

**SPEKTRALE ANALYSE
SCHWACHER RÖNTGENSPEKTREN
MITTELS EINER NEUEN
VIELFILTERMETHODE**

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

**Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Freien Universität Berlin**

vorgelegt von

Diplom-Physiker Konrad Wegener

aus Landsberg
an der Warthe

1967

Druck:
ERNST-REUTER-GESELLSCHAFT
der Förderer und Freunde der Freien Universität Berlin e. V.
DISSERTATIONS-DRUCKSTELLE
1 Berlin 33, Garystr. 45

SPEKTRALE ANALYSE SCHWACHER RÖNTGENSPEKTREN MITTELS EINER NEUEN VIELFILTERMETHODE

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Freien Universität Berlin

vorgelegt von

Diplom-Physiker Konrad Wegener

aus Landsberg

an der Warthe

1. Gutachter: Prof. Dr. R. Hosemann

2. Gutachter: Prof. Dr. R. Honerjäger

Tag der mündlichen Prüfung: 28. Juni 1967

Tag der Promotion: 17. Dez. 1967



Inhalt

=====

	Seite
1. Einleitung	1
2. Theorie der Spektralanalyse mit Filtern	4
2.1. Projektion in Filterfunktionsraum	4
2.2. Eigenschaften der Projektion	6
2.2.1. Integral	7
2.2.2. Auflösungsvermögen	7
2.3. Fehlerabschätzung	9
3. Experimentelles Beispiel	14
3.1. Aufgabestellung	14
3.2. Prinzip des experimentellen Aufbaus	14
3.3. Realisierung des experimentellen Aufbaus	17
3.3.1. Röntgenröhre und Streukammer	17
3.3.2. Spektrometer	21
3.3.3. Zähleinrichtung	23
3.3.4. Herstellung der Filter	23
3.4. Messungen	25
3.4.1. Messung der Filterdurchlässigkeit, Eigenschaften dieses speziellen Filtersystems	25
3.4.2. Messung der Streustrahlung mit Filtern	40
3.4.3. Messung der Streustrahlung mit Kristall	47
3.5. Diskussion der Ergebnisse	54
3.5.1. Diskussion der Meßergebnisse	54
3.5.2. Anwendung und Grenzen der Filtermethode	56
4. Zusammenfassung	58
5. Literaturverzeichnis	60
6. Verzeichnis der mathematischen Symbole	61

1. Einleitung

=====

Zur Analyse von Röntgenspektren werden heute im wesentlichen zwei Methoden benutzt: Die Impulshöhenspektrometrie und die Analyse mit Hilfe eines Monochromatorkristalls. Beiden Methoden haften spezifische Vor- und Nachteile an: Das hohe Auflösungsvermögen eines Kristallspektrometers steht - besonders bei kurzen Wellenlängen - in Verbindung mit verhältnismäßig großen Intensitätsverlusten im Monochromatorkristall. Die Impulshöhenanalyse dagegen ist fast frei von Intensitätsverlusten, doch ihr Auflösungsvermögen ist - bedingt durch das des Zählrohrs oder des Szintillationszählers - ganz erheblich schlechter.

Bei der Suche nach weiteren Möglichkeiten einer spektralen Zerlegung erhebt sich immer wieder die Frage, welche Methoden zur Monochromatisierung von Röntgenspektren überhaupt denkbar sind. Wichtig für eine Monochromatisierung ist stets das Herstellen einer "Torfunktion" ("Gate", "Fenster"), also eines Verfahrens, das einen schmalen, möglichst zusammenhängenden Teil des Spektrums annähernd ungehindert passieren läßt, während die anderen Teile stark unterdrückt werden. Bei den beiden oben genannten Methoden wird die Torfunktion vom Experiment selbst realisiert, sei es durch Ausblendung eines gewissen Winkelbereichs beim Kristallspektrometer, sei es durch die obere und untere Schwelle des Diskriminators beim Impulshöhenspektrometer.

Prinzipiell anders verläuft die Bildung einer Torfunktion nach Ross [1]. Das von ihm vorgeschlagene und experimentell erprobte Verfahren beruht darauf, das Spektrum $s(\lambda)$ abwechselnd durch zwei Filter aus verschiedenen Elementen zu senden. Die Durchlässigkeitsfunktionen der Filter $g_1(\lambda)$ und $g_2(\lambda)$ müssen sich im

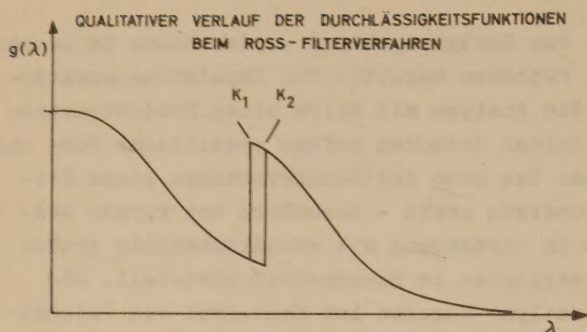


Abb. 1

Durchlässigkeits-
funktionen beim
Ross-Filterverfahren

gesamten Wellenlängenbereich decken bis auf den Bereich $K_1 \leq \lambda \leq K_2$ zwischen den K-Absorptionskanten der Elemente (Abb. 1). Hinter den Filtern werden dann die Intensitäten

$$\int_{K_1}^{\infty} s(\lambda) g_1(\lambda) d\lambda \quad \text{und} \quad \int_{K_2}^{\infty} s(\lambda) g_2(\lambda) d\lambda$$

gemessen. Die Differenz dieser beiden Werte ergibt

$$\int_{K_1}^{K_2} s(\lambda) (g_1(\lambda) - g_2(\lambda)) d\lambda.$$

Hier liefert das Experiment lediglich gewisse Informationen über das Spektrum, und die Torfunktion

$$g_1(\lambda) - g_2(\lambda)$$

wird später rechnerisch aus diesen Informationen erzeugt.

Die Intensitätsverluste dieser Methode sind mit etwa 70% gering. Das Auflösungsvermögen $\lambda/\Delta\lambda$ kann aber, - besonders bei kleinen Wellenlängen, also $\lambda \approx 0,2 \text{ \AA}$ - mit 30 recht hoch sein, wenn als Filter zwei im Perio-

densystem benachbarte Elemente verwendet werden. Das Auflösungsvermögen der Impulshöhenspektrometrie ist gegen diesen Wert mit 12 für Zählrohre und 5 für Szintillationszähler [2] recht bescheiden *. Die experimentellen Schwierigkeiten des Ross-Filterverfahrens liegen in der Notwendigkeit des sogenannten "Balancierens" der Filter, das heißt, dem Angleichen der Durchlässigkeitsfunktionen außerhalb des interessierenden Spektralbereichs. Wie ernst und wichtig das Problem des Balancierens ist, läßt sich daraus entnehmen, daß bis heute immer wieder Arbeiten veröffentlicht werden, die sich mit ihm befassen [3], [4], [5], [6], [7].

Es wäre eine reizvolle Aufgabe, diese Möglichkeit der Monochromatisierung auszudehnen auf die Messung von Spektren. Ansätze hierzu haben bereits Wollan 1934 [8] und Kappeler 1936 [9] mit einem Dreifilterverfahren gemacht, wobei die Frage des Balancierens naturgemäß noch heikler wurde.

Die vorliegende Arbeit zeigt theoretisch und experimentell eine neue Filtermethode zur Messung von Röntgenspektren. Das Filtersystem darf hierfür aus beliebig vielen, unbalancierten Filtern bestehen.

* Für die Zahlenangaben beim Zählrohr und beim Szintillationszähler ist die Halbwertsbreite der nicht sehr schnell gegen Null strebenden Durchlässigkeitsfunktionen verwendet worden, sodaß die Verhältnisse für die Filtermethode eigentlich noch günstiger liegen.

2. Theorie der Spektralanalyse mit Filtern =====

Als "Filter" sei im folgenden eine endlich dicke, möglichst homogene Schicht von Atomen ein- und desselben Elements bezeichnet. Die Durchlässigkeitsfunktion eines solchen Filters für Röntgenstrahlen hat in Abhängigkeit von der Wellenlänge etwa folgende Form:

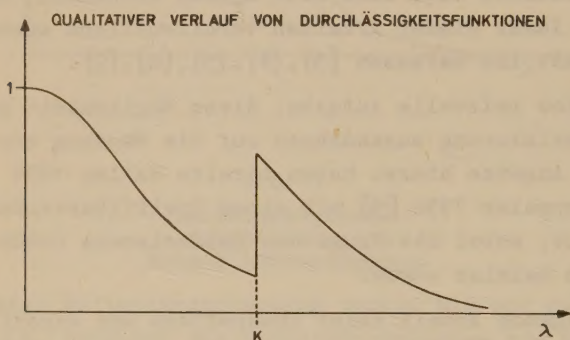


Abb. 2

Qualitative Form einer Filterfunktionskurve. K = Wellenlänge der K-Absorptionskante

"Verschieden" sollen zwei Filter heißen, wenn sie aus verschiedenen Atomsorten bestehen. Dann liegen die K-Absorptionskanten zweier verschiedener Filter bei verschiedenen Wellenlängen, und ihre Durchlässigkeitsfunktionen $g_i(\lambda)$ sind linear unabhängig.

2.1. Projektion in Filterfunktionsraum

Gegeben seien nun N verschiedene Filter und ihre Durchlässigkeitsfunktionen $g_i(\lambda)$, $i=1 \dots N$. Das zu messende Spektrum $s(\lambda)$ möge nur in einem endlichen Wellen-

längenintervall $B (\lambda_0 \leq \lambda \leq \lambda_1)$ von Null verschieden sein, und die K-Absorptionskanten K_i der Filter mögen in B liegen. Im Hilbertraum H aller in B quadratisch integrierbaren Funktionen spannen dann die g_i einen N -dimensionalen Unterraum U auf, da sie linear unabhängig sind. Indem man das Spektrum nacheinander durch die N Filter sendet und die Intensität hinter den Filtern mißt, können N Informationen über das Spektrum $s \in H^+$ gewonnen werden, nämlich $\int g_i(\lambda) s(\lambda) d\lambda$, $i=1 \dots N$. Diese Integrale seien mit $(g_i, s)^*$ abgekürzt und als "innere Produkte von s mit g_i " bezeichnet. Sie liefern die Projektion des Spektrums s in einen Teilraum von H , nämlich gerade U . Diese Projektion heiße $s'(\lambda)$. s' muß sich dann als Linearkombination der g_i darstellen lassen, wobei die Komponenten der g_i irgendwie mit den (g_i, s) zusammenhängen.

Dieser Zusammenhang läßt sich leicht mit Hilfe der Vektoralgebra herstellen. Denn die g_i kann man als Basisvektoren in U auffassen, und damit sind die (g_i, s) die kovarianten Koordinaten von s' in U bezüglich der g_i . Der metrische Tensor g_{ik} des Basissystems läßt sich schnell ermitteln:

$$g_{ik} = (g_i, g_k)$$

Der hierzu inverse Tensor heiße g^{ik} . s' kann man dann durch

$$s'(\lambda) = \sum_{i,k} g^{ik} (g_k, s) g_i(\lambda)$$

ausdrücken. Um den notwendigen Rechenaufwand klein zu halten, empfiehlt es sich, die "inversen" oder "reziproken Vektoren" g^i

$$g^i(\lambda) = \sum_k g^{ik} g_k(\lambda) \quad (1)$$

⁺ Die Formulierung $s \in H$ (sprich: "s Element aus H") bedeutet, daß die Funktion s in H liegt.

^{*} Im folgenden ist stets $(a, b) = (b, a)$, da alle Funktionen reell sind.

ein- für allemal (womöglich unter Benutzung einer elektronischen Rechananlage) zu bestimmen. Die Darstellung von s'

$$s' = \sum_k g^k(g_k, s) \quad (2)$$

kann dann - mit den jeweils gemessenen (g_k, s) - auch von Hand berechnet werden.

2.2. Eigenschaften der Projektion

Gleichung (1) kann auch in der Form

$$s' = Gs$$

geschrieben werden, wobei G der Projektionsoperator nach U ist. Da G öfter benutzt werden wird, seien seine Eigenschaften hier kurz erwähnt.

Man kann G als Integraloperator mit dem Kern

$$F(\lambda, \lambda') = \sum_k g^k(\lambda) g_k(\lambda')$$

ausdrücken. Seine Wirkung ist wie in Gleichung (1)

$$\begin{aligned} Gs &= \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} F(\lambda, \lambda') s(\lambda') d\lambda' = \int \sum_k g^k(\lambda) g_k(\lambda') s(\lambda') d\lambda' = \\ &= \sum_k g^k(\lambda) (g_k, s) = s'. \end{aligned}$$

Ohne Beweis seien noch folgende Eigenschaften von G aufgezählt:

1. G ist hermitesch: $(Gs_1, s_2) = (s_1, Gs_2)$
2. $G^2 = G$
3. G zerlegt den Hilbertraum H in zwei orthogonale Teilräume U und $H \ominus U$ derart, daß jedes $s \in H$ sich zerlegen läßt in $s = s' + s''$ mit
 $s' \in U, \quad s' = Gs$
 $s'' \in H \ominus U, \quad s'' = (1-G)s \quad (s', s'') = 0.$
4. Für die Norm eines projizierten Vektors s' gilt
 $(s', s') = (Gs, Gs) = (s, Gs) \leq (s, s);$
das Gleichheitszeichen gilt genau dann, wenn $G=1$ oder $s \in U$ ist.
5. Alle Vektoren aus U sind Eigenvektoren zu G zum Eigenwert 1. Alle Vektoren aus $H \ominus U$ sind Eigenvektoren zu G zum Eigenwert 0.

2.2.1. Integral

Es ist wahrscheinlich, daß die oben beschriebene Filtermethode zu physikalisch völlig unbrauchbaren Ergebnissen führen wird, wenn man nicht sicher stellt, daß das Integral des Spektrums s über das Intervall B bei der Projektion erhalten bleibt. Diese Bedingung läßt sich jedoch mit fast trivialen Mitteln erfüllen.

Denn die (s, g_i) sind gegen die Projektion G invariant (sie sind die einzigen Eigenschaften von s , die erhalten bleiben). Das Integral von s läßt sich aber

$$(s, 1) = \int 1 \cdot s(\lambda) d\lambda$$

schreiben, wobei 1 der Vektor aus H ist, dessen Komponenten alle Eins sind. Um dieses Integral gegen G invariant zu machen, braucht man dem bestehenden Filtersystem nur noch das Filter mit der Durchlässigkeit 1 hinzuzufügen. Unter einem System von N Filtern soll daher in Zukunft ein Filtersystem verstanden werden, dessen nulltes Filter "gar kein Filter" bedeutet. Dies soll im weiteren als "1-Filter" bezeichnet werden.

2.2.2. Auflösungsvermögen

Bei der Projektion geht die Komponente $(1-G)s$ verloren. Dieser Informationsverlust kann, da nun das Integral jedes beliebigen Spektrums erhalten bleibt, nur noch die Form von s' , also das Auflösungsvermögen betreffen. Dabei leuchtet unmittelbar ein, daß der Abstand der K -Absorptionskanten für das Auflösungsvermögen entscheidend sein wird. Sind die Filter derart numeriert, daß die Wellenlängen K_i ihrer K -Absorptionskanten in steigender Reihenfolge stehen

$$\lambda_0 = K_0 < K_1 < K_2 \dots K_N < K_{N+1} = \lambda_1,$$

so teilt diese Anordnung B in $N+1$ Teilintervalle B_i mit den Längen

$$\Delta B_i = K_{i+1} - K_i, \quad i=0,1,\dots,N.$$

Innerhalb eines solchen Teilintervalls B_i werden die g_k keine nennenswerte Krümmung besitzen, und das dargestellte Spektrum s' wird annähernd ein Geradenabschnitt sein. Alle weiteren Feinheiten von s innerhalb B_i gehen also verloren. Im benachbarten B_{i+1} hat genau eins der g_k seinen Mittelwert gegenüber dem von B_i entscheidend geändert. So wird der dort dargestellte Teil von s wieder ein Geradenabschnitt sein, jedoch mit anderer Höhe und womöglich anderer Steigung. Ein Spektrum wird demnach durch $N+1$ diskontinuierliche Geradenabschnitte dargestellt. Man könnte so zu der Vermutung kommen, daß das Auflösungsvermögen einfach durch folgende $N+1$ Torfunktionen t_i charakterisiert werden kann:

$$t_i = \begin{cases} =0, & \text{wenn } \lambda \notin B_i, \\ \neq 0, & \text{wenn } \lambda \in B_i. \end{cases}$$

Das würde bedeuten, daß es lediglich auf die Dichte der K-Absorptionskanten in B ankommt. Jedoch stimmt diese Vermutung nicht ganz. Denn wenn die g_i tatsächlich wie die t_i projizieren würden, dann müßten die t_i im Filterfunktionsraum U liegen, also von den g_i linear kombiniert werden können. Dies trifft aber im allgemeinen sicher nicht zu, denn das identische Verschwinden der t_i außerhalb B_i wird sicher nur von ganz speziellen, nämlich balancierten Filtersystemen g_i , geleistet. Torfunktionen, die durch die g_i wirklich streng darstellbar sind, können also im allgemeinen außerhalb B_i nicht vollständig verschwinden. Physikalisch bedeutet dieser Umstand, daß ein Teil des Spektrums s , der vor der Projektion in B_i lag, von G durchaus in ein anderes Teilintervall B_n "verschleppt" werden kann. Das Auflösungsvermögen wird demnach schlechter sein als das der t_i .

Das Maß dieser Verschlechterung läßt sich, wie folgt, ermitteln: Die t_i seien jetzt definiert als

$$t_i = \begin{cases} 0, & \text{wenn } \lambda \notin B_i, \\ 1, & \text{wenn } \lambda \in B_i. \end{cases}$$

Dann ist $t_i' = Gt_i$ die Projektion von t_i nach U. Man könnte sich diese Funktionen aufzeichnen und feststellen, welcher Anteil von t_i nach anderen Intervallen abgewandert ist. Einfacher ist es aber, auszurechnen, um wieviel das Integral von t_i' innerhalb des Intervalls B_i gegenüber dem von t_i kleiner geworden ist^{*}. Zu berechnen wäre also der Quotient

$$q_i = \int_{B_i} t_i' d\lambda / \int_{B_i} t_i d\lambda$$

oder, da t_i außerhalb B_i verschwindet, und da $\int_{B_i} t_i d\lambda = \Delta B_i$,

$$q_i = \int_{\lambda_i}^{\lambda_s} t_i' t_i d\lambda / \Delta B_i = (t_i', t_i) / \Delta B_i$$

$$q_i = (t_i, Gt_i) / \Delta B_i. \quad (3)$$

Die q_i sind somit ein quantitatives Maß für die Güte einer Spektraldarstellung. Sind alle $q_i = 1$, so ist das Filtersystem balanciert und sein Auflösungsvermögen ist identisch mit dem der Torfunktionen t_i . Je kleiner die q_i sind, desto weniger brauchbar wird das Filtersystem sein. Daher sollen die q_i im folgenden als "Gütefaktoren" bezeichnet werden.

2.3. Fehlerabschätzung

Eine Formel für den Fehler $\delta s'$ des dargestellten Spektrums s' läßt sich aus Gleichung (2) herleiten. Es kommen zwei Fehlerquellen in Frage:

^{*} Das Integral kann auf keinen Fall größer werden. Denn $\int_{B_i} t_i' d\lambda = (t_i', t_i) = (t_i, Gt_i) = (Gt_i, Gt_i) < (t_i, t_i) = \int_{B_i} t_i d\lambda$. Das Zeichen "<" gilt hier, weil $t_i \notin U$ ist.

1. Die g^k sind aus - irgendwie gemessenen - g_k ausgerechnet worden. Ihr Fehler δg^k ist daher mit den Fehlern der gemessenen g_k verknüpft.
2. Bei der Messung der Integralwerte (g_k, s) kommt den g_k allein kein Fehler zu; denn das Spektrum s ist wirklich mit den wahren Durchlässigkeitsfunktionen g_k integriert worden. So ist für diese Größe nur der Fehler $\delta(g_k, s)$ zu betrachten.

Daraus ergibt sich nach Gleichung (2)

$$\delta s' = \sum_k \delta g^k(g_k, d) + \sum_k g^k \delta(g_k, s). \quad (4)$$

Die beiden Terme dieses Ausdrucks, die $\delta s_1'$ und $\delta s_2'$ heißen sollen, sind unkorreliert. Darum muß für den Mittelwert des Fehlerquadrates

$$\overline{\delta s'^2} = \overline{\delta s_1'^2} + \overline{\delta s_2'^2}$$

gesetzt werden. Etwas schwierig gestaltet sich die Abschätzung von $\delta s_1'$. Denn die g^k gehen über eine Matrizeninversion aus den g_k hervor, und Fehler sind auf diesem Wege schwer zu verfolgen. Deshalb sei folgendermaßen vorgegangen:

δg^k wird in die zwei orthogonalen Komponenten

$$\begin{aligned} \delta g^k &= G \delta g^k + (1-G) \delta g^k \\ &= \delta g^{k'} + \delta g^{k''} \end{aligned}$$

zerlegt, womit sich

$$\delta s_1' = \sum_k \delta g^{k'}(g_k, s) + \sum_k \delta g^{k''}(g_k, s)$$

schreiben läßt. Der zweite Summand von $\delta s_1'$ liegt also vollständig in $H \ominus U$. Da aber das Spektrum s ohnehin nur bis auf Vektoren aus $H \ominus U$ dargestellt wird, darf man zu jeder Lösung s' einen Vektor aus $H \ominus U$ addieren, ohne das Ergebnis physikalisch zu ändern. Der

zweite Term ist daher im eigentlichen Sinne kein Fehler, obwohl er eine Änderung von s' bewirkt. Er kann also vernachlässigt werden^{*}. Damit bleibt

$$\delta s_1' = \sum_k \delta g^{k'}(g_k, s)$$

übrig, wobei

$$\delta g^{k'} = G \delta g^k = \sum_i g^i(g_1, \delta g^k) \quad (5)$$

ist. Wegen der Orthogonalitätsrelation

$$(g_i, g^k) = \begin{cases} 0, & \text{wenn } i \neq k, \\ 1, & \text{wenn } i = k \end{cases}$$

gilt

$$(\delta g_i, g^k) + (g_i, \delta g^k) = 0.$$

Setzt man diese Beziehung in Gleichung (5) ein, so folgt

$$\delta g^{k'} = - \sum_i g^i(\delta g_i, g^k),$$

und für $\delta s_1'$ gilt

$$\delta s_1' = - \sum_{i,k} g^i(\delta g_i, g^k)(g_k, s) = - \sum_i g^i(\delta g_i, Gs)$$

$$\delta s_1' = - \sum_i g^i(\delta g_i, s'). \quad (6)$$

Die δg_i sind beliebige Funktionen mit der einen Einschränkung

$$|\delta g_i(\lambda)| \leq \varepsilon_1, \quad (7)$$

wenn ε_1 der Absolutwert des Meßfehlers ist. Es soll nun ein Erwartungswert $\delta s_1'^2$ für das Quadrat von $\delta s_1'$ errechnet werden, indem $\delta s_1'^2$ über alle möglichen Funk-

^{*} Anschaulich bedeutet der zweite Term die Änderung von s' , die sich ergibt, wenn man zu einem infinitesimal zu den g^i benachbarten Basissystem übergeht. Die Qualität der Darstellung des Spektrums im Sinne der Auflösung wird davon unberührt bleiben.

tionen δg_i , die (7) erfüllen, gemittelt wird:

$$\begin{aligned}\overline{\delta s_1'^2} &= \sum_{i,k} g^i g^k \overline{(\delta g_i, s')(\delta g_k, s')} \\ &= \sum_{i,k} g^i g^k \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} d\lambda d\lambda' \overline{\delta g_i(\lambda) \delta g_k(\lambda') s'(\lambda) s'(\lambda')}\end{aligned}$$

Da δg_i und δg_k für $i \neq k$ sicher unkorreliert sind, darf der Mittelwert des Produktes durch das Produkt der Mittelwerte ersetzt werden:

$$\overline{\delta g_i \delta g_k} = \overline{\delta g_i} \cdot \overline{\delta g_k} = 0, \quad i \neq k$$

So erhält man

$$\overline{\delta s_1'^2} = \sum_i g^{i2} \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} d\lambda d\lambda' \overline{\delta g_i(\lambda) \delta g_i(\lambda') s'(\lambda) s'(\lambda')}. \quad (8)$$

$\overline{\delta g_i(\lambda) \delta g_i(\lambda')}$ läßt sich weiter abschätzen, wenn man berücksichtigt, daß bei großen Abständen $\lambda - \lambda'$ zwischen den beiden Fehlern keine Korrelation herrschen kann. Beispielsweise werden die Fehler an den Stellen λ_0 und λ_1 voneinander völlig unabhängig sein. Sind jedoch λ und λ' genügend nah beieinander, so wird

$$\delta g_i(\lambda) \approx \delta g_i(\lambda')$$

gelten. Es ist daher zweckmäßig, eine Korrelationslänge L einzuführen, innerhalb derer

$$|\delta g_i(\lambda)| = |\delta g_i(\lambda')| = \varepsilon_1$$

abgeschätzt werden kann, wenn $\lambda - L/2 \leq \lambda' \leq \lambda + L/2$. Fällt λ' aus diesem Intervall heraus, so soll näherungsweise keine Korrelation zwischen $\delta g_i(\lambda)$ und $\delta g_i(\lambda')$ bestehen. Mit dieser Abschätzung läßt sich Gleichung (8) auf

$$\begin{aligned}\overline{\delta s_1'^2} &= \sum_i g^{i2} \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} d\lambda \int_{\lambda-L/2}^{\lambda+L/2} \overline{\delta g_i(\lambda) \delta g_i(\lambda') s'(\lambda) s'(\lambda')} \\ &\leq \sum_i g^{i2} \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} (\lambda s'(\lambda) \varepsilon_1)^2 \int_{\lambda-L/2}^{\lambda+L/2} d\lambda' s'(\lambda')\end{aligned}$$

vereinfachen, oder, wenn man $\int_{\lambda-L/2}^{\lambda+L/2} d\lambda' s'(\lambda')$ als Faltung ^{*} mit der Rechteckfunktion

$$\Theta = \begin{cases} 0 & \text{für } |\lambda| > L/2 \\ 1 & \text{für } |\lambda| \leq L/2 \end{cases}$$

auffaßt, auf

$$\overline{\delta s_1'^2} \leq \varepsilon_1^2 \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} s'(\lambda) \widehat{s \Theta} d\lambda \cdot \sum_i [g^i(\lambda)]^2.$$

Der zweite Term $\delta s_2'$ des Fehlers $\delta s'$ aus Gleichung (4) läßt sich schnell abschätzen. Der Mittelwert des Quadrates ist

$$\overline{\delta s_2'^2} = \sum_{i,k} g^i g^k \overline{\delta(g_i, s) \delta(g_k, s)}.$$

Hier sind wiederum $\delta(g_i, s)$ und $\delta(g_k, s)$ unkorreliert, und es folgt

$$\overline{\delta s_2'^2} = \sum_i g^{i2} \varepsilon_2^{i2},$$

wenn ε_2^i der mittlere Fehler von (g_i, s) ist. Es ist an dieser Stelle nicht empfehlenswert, die ε_2^i pauschal zu einem Fehler ε_2 zusammenzufassen, weil die (g_i, s) , und damit auch die ε_2^i , von recht unterschiedlicher Größe sein können. Für das Gesamtfehlerquadrat $\delta s'^2$ ergibt sich damit

$$\overline{\delta s'^2} = \sum_i g^i(\lambda)^2 \left[\varepsilon_1^2 \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} s'(\lambda) \widehat{s \Theta} d\lambda + \varepsilon_2^{i2} \right]. \quad (9)$$

* Unter dem "Faltungsintegral" $\widehat{a(x)b(x)}$ zweier Funktionen a und b aus H wird die Funktion

$$a(x) \widehat{b(x)} = \int_{-\infty}^{+\infty} a(y) b(x-y) dy$$

verstanden.

3. Experimentelles Beispiel

=====

3.1. Aufgabestellung

Es sollen Messungen gemacht werden, die bisher - offenbar wegen der mit ihnen verbundenen Intensitätsschwierigkeiten - unterblieben sind; nämlich die Messung des Intensitätsverhältnisses von kohärenter zu inkohärenter Streustrahlung (Comptonstrahlung) bei kurzer Primärwellenlänge ($0,21 \text{ \AA}$) und schweren Streustrahlern. Ähnliche Messungen sind bereits von Woo [10], [11], [12] 1927 durchgeführt worden für eine größere Primärwellenlänge ($0,56 \text{ \AA}$), einem Streuwinkel von 120° und Streustrahlern der Ordnungszahl 3 bis 29. Seine Messungen, die überaus langwierig gewesen sein sollen, zeigen bei den Elementen ab Ordnungszahl 21 eine systematische, mit der Ordnungszahl steigende Abweichung von der Theorie [13], [14], [15], [16], [17], eine Erscheinung, auf die Hosemann [18], [19] als erster hingewiesen hat. Aus diesem Grund sind Messungen der oben erwähnten Art besonders interessant.

3.2. Prinzip des experimentellen Aufbaus

Vom Experiment sollen drei Aufgaben bewältigt werden:

1. Die Herstellung der Primärstrahlung von $0,21 \text{ \AA}$ (=W-K_α-Strahlung).
2. Die Herstellung geeigneter Filter und Messung ihrer Durchlässigkeitsfunktionen.
3. Die Messung des Comptonpektrums an verschiedenen Streuern mit Hilfe der Filter, und zum Vergleich die Messung des Comptonpektrums wenigstens eines Streuers mit Hilfe eines Kristallspektrometers.

Diese Aufgaben können im Prinzip durch den in den Abbildungen 3, 4, 5 gezeigten Aufbau gelöst werden. F ist Fokus einer Röntgenröhre mit Wolfram-anode. Charakteristische und Brems-Strahlung der Röhre treten durch

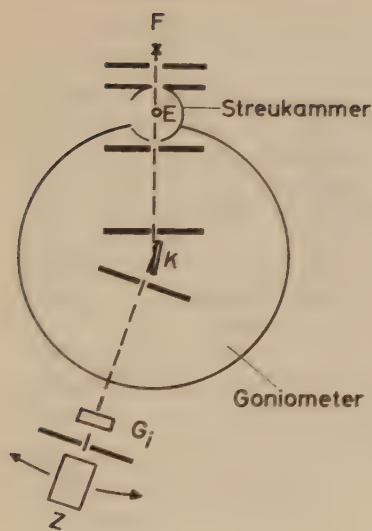


Abb. 3
Prinzip-Aufbau
zur Messung der
Durchlässigkeiten

ein Blendensystem in die Streukammer, um deren Zentrum E das nachfolgende Goniometer geschwenkt werden kann. Zeichnung 3 verdeutlicht den Aufbau für die Messung der Durchlässigkeitsfunktionen: Die Strahlung passiert ungehindert die Streukammer und fällt durch das Blendensystem des Goniometers auf den Monochromatorkristall K, der - je nach dem eingestellten Braggwinkel - eine bestimmte Wellenlänge aussiebt. Vor dem Zähler Z lassen sich die auswechselbaren Filter G_1 anbringen.

Zeichnung 4 und 5 zeigen den Aufbau für die Messung von Streuspektren: Das Goniometer wird um die Achse E auf den Streuwinkel geschwenkt, der ursprünglich der Streukammer mit einem Primärstrahlfänger verschlossen und das Streupräparat in die Kammer gehängt. Um die in diesem Fall störende Bremsstrahlung der Röhre und die $W-K_B$ -Strahlung möglichst klein zu halten, wird ein Filter zwischen Röhrenfokus und erstes Blendenpaar geschoben. Ferner wird zur Erhöhung der Intensität das schmale Blendenpaar des Goniometers durch einen Kollimator aus vielen parallelen Blechen

ersetzt.

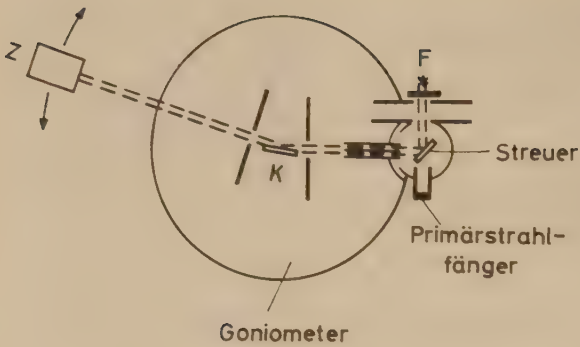


Abb. 4

Zeichnung 4 zeigt im übrigen die Messung des Compton-spektrums mit Kristall, Zeichnung 5 die mit Filtern (G_i).

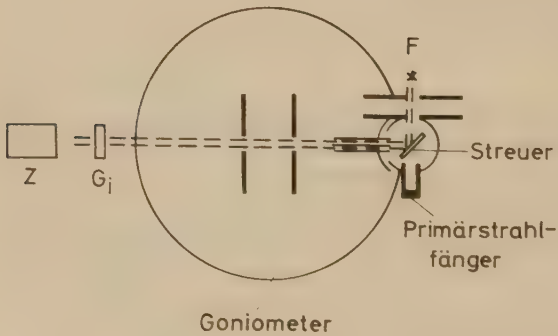


Abb. 5

Das Wellenlängenintervall, in dem das Spektrum von Null verschieden sein wird, hängt von der Anregungsspannung der Röntgenröhre und ihrem Austrittsfenster ab. Bei einer Anregungsspannung von 150 kV und einem Röhrenfenster von 0,6 mm Kupfer liegt dieser Bereich - ganz grob - etwa zwischen 0,1 und 0,3 Å. Als Filtermaterial kommen daher Elemente in Frage, deren K-Absorptionskanten zwischen diesen Grenzen liegen, also Elemente mit Ordnungszahlen ab 58. Der für die Primär- und Comptonstrahlung besonders interessante Bereich, etwa 0,20 Å bis 0,25 Å, wird von den Elementen Europium bis Lutetium (Cassiopeium) überdeckt. Hier sollten die K-Absorptionskanten dichter liegen als in den "Außenbezirken".

Die Filterauswahl wurde allerdings weniger von diesen theoretischen Überlegungen als von praktischen Gesichtspunkten - wie Erhältlichkeit und Preis der Elemente oder geeigneter Verbindungen - bestimmt. Die verwendeten Filtermaterialien seien an dieser Stelle mit ihren K-Absorptionskanten angeführt:

Z	Element	K (Å)	Z	Element	K (Å)
58	Ce	0,306	68	Er	0,216
59	Pr	0,295	70	Yb	0,202
62	Sm	0,265	74	W	0,178
64	Gd	0,247	79	Au	0,153
66	Dy	0,230	82	Pb	0,141
67	Ho	0,223			

3.3. Realisierung des experimentellen Aufbaus

3.3.1. Röntgenröhre und Streukammer

Als Röntgenröhre wurde eine Hohlanodenröhre vom Typ WOE 150/30 der Firma Telefunken gewählt. Sie bietet folgende Vorteile:

1. Sie erlaubt bei einer Anregungsspannung von 150 kV eine Belastung mit 20 mA.
2. Sie hat dank magnetischer Fokussierung einen Brennfleck von nur 4 mm Ø.
3. Sie gestattet eine kompakte Bauweise um die Anode herum.

Ihre Stromversorgung geschah mit einer Isovolt-Anlage der Firma Seifert. Der Nachteil der Röhre, nämlich die verhältnismäßig starke Emission von Röntgenstrahlen auch außerhalb der Anode verbunden mit einer mangelhaft abgeschirmten Röhrenhaube, wurde dadurch überwunden, daß die Röhre einschließlich ihrer Haube mit einer 4 mm starken Bleiwandung umgeben wurde.

Das Anodenrohr selbst, das noch einen doppelten Aluminiummantel für die Kühlwasser Zu- und Abführung trägt, wurde mit einer 12 mm dicken Bleiabschirmung versehen. Abb. 6 zeigt den Schnitt durch die Hohlanode und ihre Abschirmung, die fest mit der Streukammer verbunden ist.

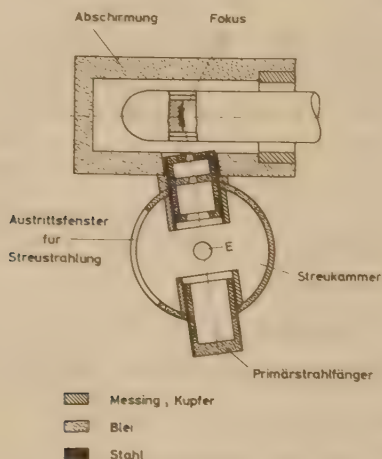


Abb. 6

Schnitt durch die Röhrenanode,
den Bleimantel und die Streu-
kammer

Die Streukammer ist eine mit Blei abgeschirmte Messingdose, die mit 5 Öffnungen versehen ist. Zwei Öffnungen sind für den Primärstrahl vorgesehen. Ein kreisrunder Bleiblenndenstock ist in die der Anode zugewandte Öffnung eingepaßt. Seine ersten zwei Blenden (4 mm $\varnothing$) bilden die eigentlichen Eintrittsblenden, während die der Anode abgewandte Blende lediglich das Austrittsfenster der Streukammer vor Blendenstreuung schützt. In die Austrittsöffnung für den Primärstrahl kann ein Primärstrahlfänger eingesetzt werden. Er besteht aus einem kreisrunden Bleitopf, der so tief ist, daß Fluoreszenzstrahlung und Streustrahlung, die in ihm erzeugt werden, nicht in das Austrittsfenster gelangen können. Eine weitere Öffnung der Kammer dient dem Austritt der Streustrahlung, eine Öffnung im Deckel (nicht eingezeichnet) erlaubt das Hineinhängen des Streupräparates. Die zentrische Öffnung E im Boden der Kammer läßt das Einjustieren des Goniometertisches zu, so daß das Goniometer tatsächlich um die Achse E in Abb. 3 schwenkbar ist. Die Konstruktion der Kammer gestattet es, den Blendenstock durch die Öffnung des Primärstrahlfängers ins Freie zu ziehen, so daß man vor der ersten Blende ein Filter zur Unterdrückung der W-K _{β} -Strahlung ansetzen kann.

Als Filter wurde ein Yb-Blech von 0,6 mm Dicke benutzt. Die Wirkung dieses Filters kann den beiden folgenden Abbildungen entnommen werden. Abb. 7 zeigt das ungefilterte Spektrum der Wolframröhre bei der Anregungsspannung von 150 kV, das mit Hilfe des Aufbaus nach Abb. 3 gemessen wurde. Der mit "Pb-K" bezeichnete Sprung der Zählrate im kurzwelligen Teil des Bremsspektrums ist darauf zurückzuführen, daß Blei als Blendenmaterial verwendet wurde. Hinter der K-Absorptionskante von Blei werden die Blenden daher durchlässiger und die Zählrate steigt. Abb. 8 zeigt zum Vergleich dasselbe Röhrenspektrum, nur gefiltert mit 0,6 mm Yb. Die W-K _{β} -Linie ist hier ausgezeichnet unterdrückt und wird bei den folgenden

Messungen keinen störenden Einfluß ausüben.

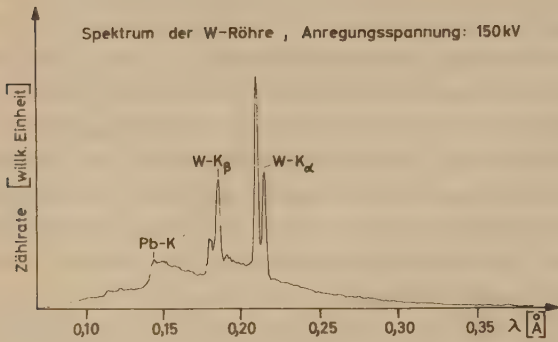


Abb. 7

Ungefiltertes Röhrenspektrum, gemessen mit
Spektrometer aus Abb. 9 nach Aufbau aus Abb. 3

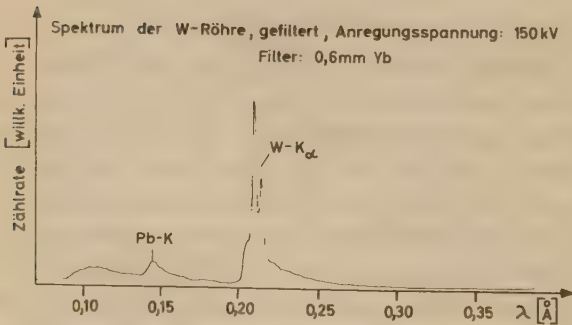


Abb. 8

Gefiltertes Röhrenspektrum, gemessen mit
Spektrometer aus Abb. 9 nach Aufbau aus Abb. 3

Die "Güte" der Streukammer wurde nach dem Aufbau aus Abb. 5, jedoch ohne auswechselbare Filter, gemessen: Sie sei definiert als das Verhältnis der Intensitäten bei vorhandenem und herausgenommenen Streuer. Sie liegt bei diesem Aufbau zwischen 10^3 und 10^4 , reicht also für die beabsichtigten Messungen bei weitem aus. *

3.3.2. Spektrometer

Als Spektrometer diente ein Goniometer der Firma Berthold, das etwas abgeändert wurde (Abb. 9).

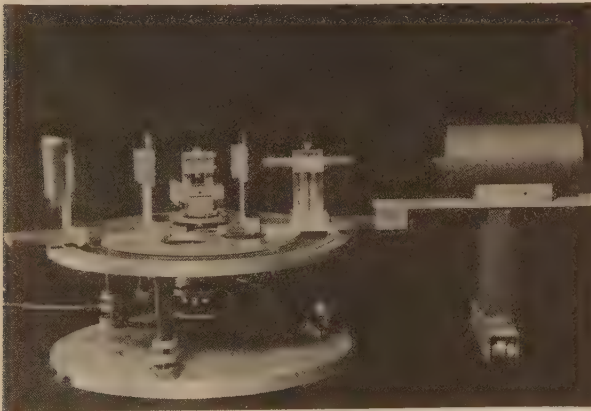


Abb. 9
Spektrometer

Es arbeitet mit einem ebenen Quarz-Analysatorkristall, der wegen der kurzen Wellenlängen nach Barth [20] auf die (2354)-Netzebene angeschliffen ist, und damit einen Netzebenenabstand von nur $0,781 \text{ \AA}$ besitzt. Man sieht

* An dieser Stelle möchte ich der feinmechanischen Werkstatt des Fritz-Haber-Institutes für die saubere und schöne Ausführung meiner Konstruktionen danken.

links in Abb. 9 die Halter für die Eintrittsspalte (0,5 mm Breite), die auf einer Schwalbenschwanzführung in Strahlrichtung verschoben werden können. Auf der anderen Seite des Kristalls befindet sich der Halter für die Austrittsblende, dann folgt der Filterhalter und dahinter die Bleiverkleidung des Szintillationszählers, die wegen ihres hohen Gewichts gegen den Tisch mit Kugellagern abgestützt ist.

Das Spektrometer mußte nach Abb. 3 schwenkbar um die Achse E installiert werden. Für verschiedene Zwecke ist es günstig, wenn es außerdem noch in radialer Richtung zu E verschoben werden kann. Zu diesem Zwecke wurde auf dem Tisch, auf dem es steht, eine drehbare Schiene angebracht (Abb. 10). Die Drehachse E dieser Schiene konnte mit Hilfe der Justierungsbohrung der Streukammer genügend genau mit der Achse der Streukam-

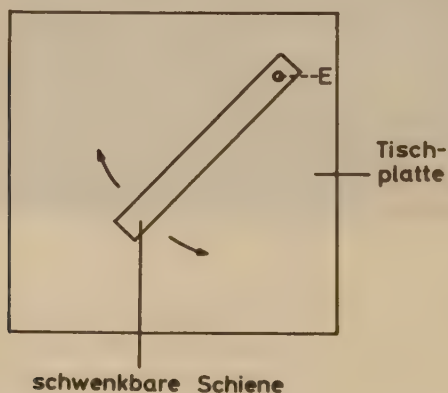


Abb. 10
Schwenkvorrichtung für
das Goniometer

mer in Deckung gebracht werden. Das Goniometer steht auf einer Aluminiumplatte, die auf dem Tisch liegt.

Sie besitzt eine Nut, die genau die drehbare Schiene aufnimmt. So kann das Goniometer mit Hilfe der Al-Platte radial auf der Schiene verschoben werden, außerdem kann es - ebenfalls auf der Platte - um E geschwenkt werden.

3.3.3. Zähleinrichtung

Zur Intensitätsmessung wurde ein Szintillationskristall (Na-J) und eine Verstärker- und Zähleinrichtung der Firma Berthold benutzt. Mit dem Impulshöhen Diskriminator dieser Anlage lassen sich thermische Impulse, ein großer Teil der Höhenstrahlung und unter Umständen unliebsame Fluoreszenzstrahlung ausschalten. Szintillationskristall und Photomultiplier wurden in ein Bleirohr von 3 cm Wandstärke (Abb. 9, ganz rechts) gebettet. Auf diese Weise konnte der Untergrund um den Faktor 10 gesenkt werden.

3.3.4. Herstellung der Filter

An die Filter sind zwei Forderungen zu stellen:

1. Die Durchlässigkeitsfunktionen verschiedener Filter sollen sich möglichst stark an ihren Absorptionskanten, möglichst wenig an anderen Stellen unterscheiden.
2. Die Massenbelegung der Filter soll über die ganze Fläche möglichst homogen sein.

Punkt 1 betrifft die Wahl der Filterdicke. Sind die Filter zu dünn, so wird die Durchlässigkeitsfunktion überall nur sehr wenig kleiner sein als Eins, und der Effekt der K-Absorptionskanten wird verschwindend klein. Macht man andererseits die Filter zu dick, dann wird zwar der relative Sprung der Durchlässigkeitsfunktion an der K-Kante beliebig groß, doch alle Funktionen werden etwa von dem in Abb. 11 skizzierten Typ sein, und der Einfluß der K-Kanten wird insgesamt wieder verschwindend klein.

Zwischen diesen beiden Extremfällen wurde die Dicke

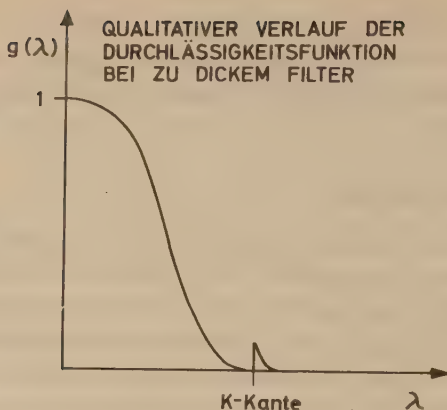


Abb. 11

Qualitativer Verlauf der
Durchlässigkeitsfunktion
bei zu großer Dicke.

so gewählt, daß die Minima der Durchlässigkeitsfunktionen nicht kleiner als etwa 10% werden können. Der Sprung an der K-Kante liegt dann ungefähr bei dem Faktor 2. Eine solche Dicke entspricht bei den vorkommenden Wellenlängen und den interessierenden Filtermaterialien etwa der Massenbelegung von 100 mg/cm^2 . Eine derartige Massenbelegung ließe sich durch Auswalzen der Metalle zu geeignet dicken Blechen erreichen. Dies Verfahren gelang jedoch nur bei dem ersten Versuch, nämlich bei Ytterbium mit Hilfe von häufigem Zwischenglühen des Metalls unter Stickstoff ^{*}. Schon der zweite Versuch, an Samarium, mißlang. Es wurde daher beschlossen, die - im übrigen auch leichter zu beschaffenden - Oxyde der Elemente zu Tabletten zu pressen. Um diesen Tabletten eine höhere Festigkeit und überdies eine handlichere Dicke zu verschaffen, wurden

^{*} Das so hergestellte Filter diente später zur Filterung des Primärspektrums.

die Oxyde mit jeweils vier Gewichtsteilen Lactose sorgfältig gemischt. Beim Pressen der Tabletten erwies es sich zudem noch als notwendig, dem Gemisch je 1% Stearin und Magnesia zuzusetzen, damit die Tabletten in der Presse nicht verklebten *. Abb. 12 zeigt die fer-

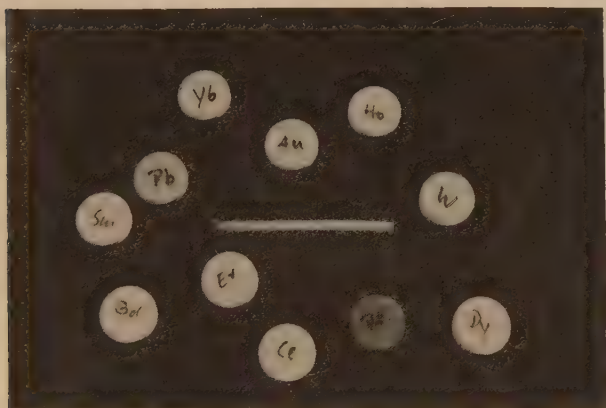


Abb. 12
Photo der Filtertabletten

tigen Filtertabletten. Die Haltbarkeit der so hergestellten Filter ist gut, wenn sie nicht allzu robust behandelt und vor Nässe geschützt werden.

3.4. Messungen

3.4.1. Messung der Filterdurchlässigkeit, Eigenschaften dieses speziellen Filtersystems

Die Messung der Filterdurchlässigkeit wurde hauptsächlich mit Hilfe des Spektrometers (Abb. 3, Abb. 9) durchgeführt. Dabei wurde aus dem in Abb. 7 gezeigten Röh-

* Herrn Hartmann aus der "Chemischen Fabrik Tempelhof" sei hiermit für seine Hilfe bei der Herstellung der Tabletten herzlich gedankt.

renspektrum eine bestimmte Wellenlänge ausgesiebt und jeweils die Intensität mit Filter und ohne Filter gemessen. Der Quotient beider Größen ergibt die Durchlässigkeit des Filters für die eingestellte Wellenlänge. Diese Methode der Messung wird bei sehr kurzen und hauptsächlich sehr langen Wellenlängen unsicher, weil die Intensität der Bremsstrahlung stark nachläßt und in vergleichbare Größenordnung mit dem "Untergrund" kommt. Dieser Untergrund besteht hier - abgesehen von dem minimalen Anteil der Höhenstrahlung - aus incoherenter Streustrahlung, die im Monochromatorkristall erzeugt wird. Vor allem bei der Messung an den höheren Wellenlängen, wo der eingestellte Winkel verhältnismäßig groß wird (12° bis 13°), muß man vermuten, daß der Anteil der Comptonstreuung im Kristall von Bedeutung ist [✱]. Die Intensität der Comptonstreuung ist aber proportional zur Integral-Intensität des einfallenden Spektrums. Wenn also für die eingestellte Wellenlänge die Intensität des Spektrums nur noch schwach ist, kann die Comptonstrahlung, die ja nicht monochromatisiert wurde, das Meßergebnis systematisch verfälschen.

Um Fehler durch diesen Effekt auszuschließen, wurden für einige diskrete Wellenlängen Kontrollmessungen nach einer etwas anderen Methode durchgeführt: Der Aufbau wurde entsprechend Abb. 5 eingestellt, jedoch

[✱] Im Gegensatz zu den Aussagen der Klein-Nishina-Formel nimmt die Intensität der im Kristall erzeugten Comptonstrahlung mit dem Streuwinkel zu, weil die Streuung hier an gebundenen Elektronen stattfindet. Der nach Wentzel [13] für die Comptonstrahlung zu berechnende Ausdruck (der "Rückstoßfaktor" spielt hier eine untergeordnete Rolle)

$$Z - \sum_k |f_{kk}|^2$$

hat bei $\lambda = 0,21 \text{ \AA}$ und $\vartheta = 7,6^{\circ}$ für Sauerstoff den Wert 8,6 und für Silizium den Wert 11,3. Man befindet sich also für diese Größenordnung von $\sin \vartheta / \lambda$ durchaus in einem Bereich, in dem der Comptonuntergrund mit dem Streuwinkel wächst.

ohne das Yb-Filter für die Primärstrahlung. Statt des Streupräparates wurde ein "Test-Element", zum Beispiel Wolfram, in die Streukammer gehängt. Dieses Testelement wird von der kurzwelligen Bremsstrahlung zu starker Fluoreszenz angeregt. Die Intensität dieser Fluoreszenzstrahlung ist so viel größer als Streueffekte am Testpräparat, daß man ohne weiteres annehmen kann, daß das Testpräparat lediglich die charakteristische K_{α} - und K_{β} -Strahlung aussendet. Gelingt es nun, die K_{β} -Strahlung auszuschalten, so hat man eine recht intensive, hinreichend monochromatische Strahlung, mit der die Durchlässigkeit der Filter zwar nur für eine Wellenlänge, dafür aber mit viel größerer Genauigkeit gemessen werden kann. Die folgende Tabelle zeigt, für welche Testelemente derartige Kontrollmessungen durchgeführt wurden:

Testelement	Filter für K_{β}	$\lambda - K_{\alpha}(\text{\AA})$
Pb	Au	0,167
W	Yb	0,211
Yb	Ho	0,238
Dy	Sm	0,272
Sm	Pr	0,311
Pr	Ce	0,346

Die Dicke der Filter, die zur Unterdrückung von K_{β} dienten, wurde so gewählt, daß der Anteil der K_{β} -Strahlung kleiner als 1% war.

Die folgenden elf Abbildungen (Abb. 13 - Abb. 23) zeigen die Durchlässigkeitsfunktionen, die mit Hilfe dieser beiden Meßmethoden erhalten wurden. Die Punkte zeigen die Meßergebnisse der Goniometermethode, die Kreise die der Kontrollmessungen. Man sieht bei größeren Wellenlängen die erwartete systematische Abweichung der Spektrometermeßwerte von den Kontrollwerten.

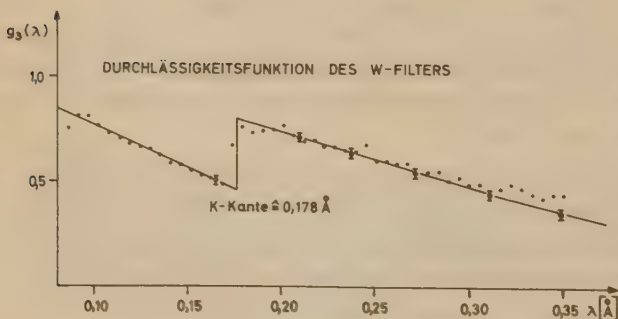
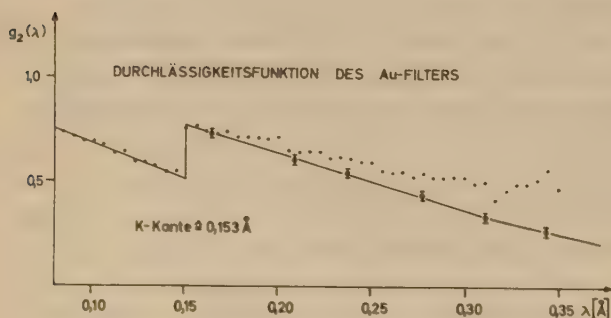
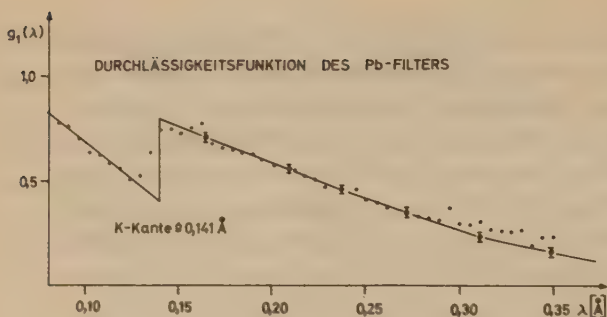


Abb. 13, Abb. 14, Abb. 15

Durchlässigkeitsfunktion des Pb-, Au-
und des W-Filters

... Spektrometer-, $\square$ $\square$ Kontrollmessungen

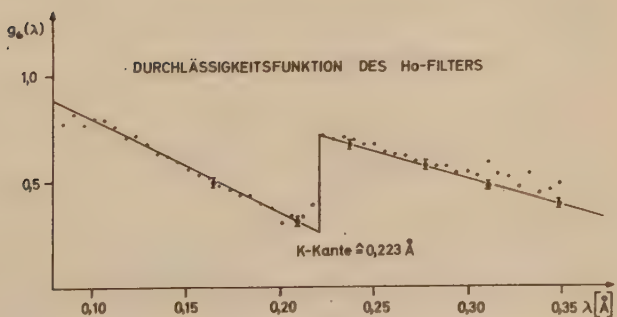
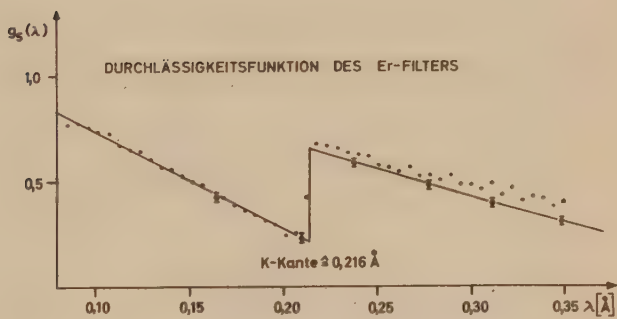
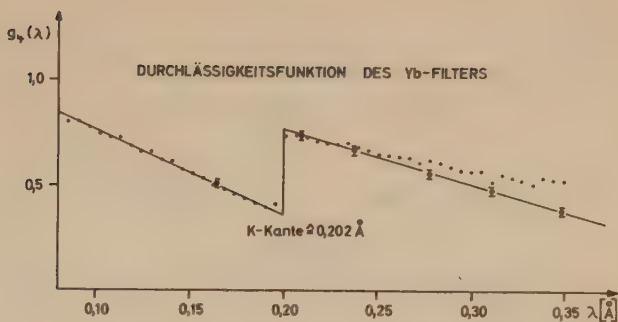


Abb. 16, Abb. 17, Abb. 18
Durchlässigkeitsfunktion des Yb-, Er-
und des Ho-Filters

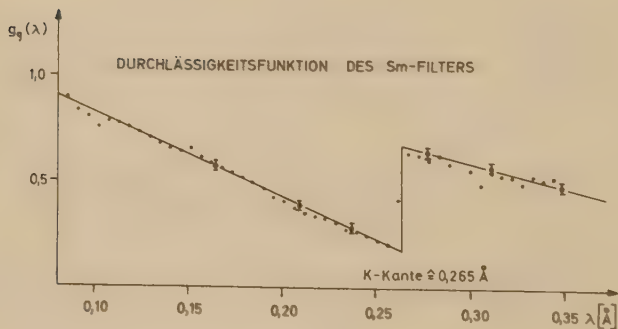
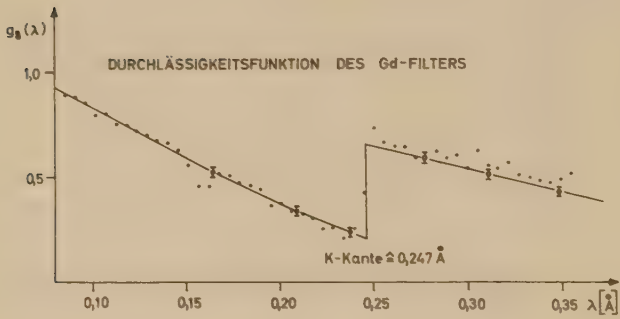
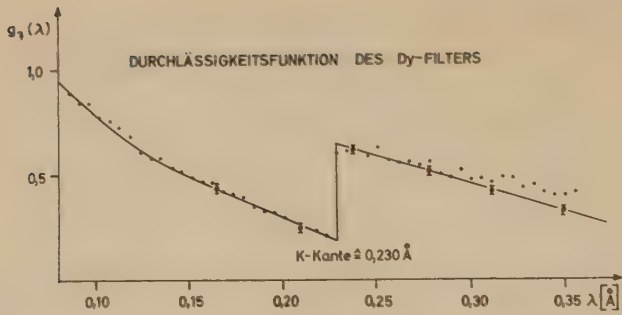


Abb. 19, Abb. 20, Abb. 21
Durchlässigkeitsfunktion des Dy-, Gd-
und des Sm-Filters

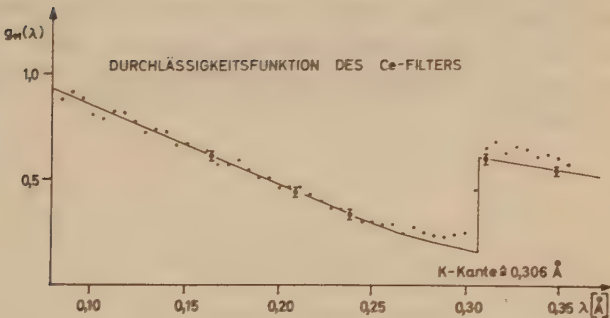
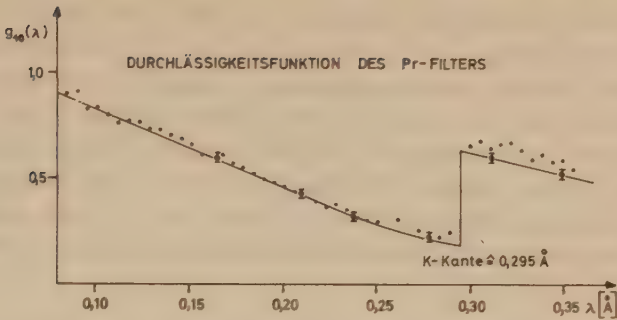


Abb. 22, Abb. 23

Durchlässigkeitsfunktionen des Pr-
und des Ce-Filters

Die genaue Lage der K-Absorptionskanten wurde der Literatur entnommen [21], und der Verlauf der Durchlässigkeitsfunktionen in ihrer Nähe gegen sie extrapoliert.

Besonders auffällig sind die Meßfehler bei der Gold-tablette. Sie sind darauf zurückzuführen, daß zu ihrer Herstellung aus äußeren Gründen Goldpulver verwendet worden war, das sich offenbar nicht so gleichmäßig

mit dem Milchsucker in der Pablette gemischt hat wie die Oxyde der anderen Materialien. Bei der Messung an Ger zersprang die Dy-Pablette, die zur Kontrollmessung benutzt wurde, sodaß der Verlauf dieser Durchlässigkeitskurve kurz vor der Absorptionskante nur geschätzt werden konnte. Trotzdem wurden beide Filter nicht aus dem System herausgelassen, da ihre Fehler die Meßergebnisse kaum beeinflussen und für die Betrachtung der Fehlerfortpflanzung besonders interessant sind.

Zur Berechnung der inversen Funktionen $g^i(\lambda)$ wurde das durchgemessene Wellenlängenintervall in 54 gleiche Teilintervalle geteilt, wodurch die weiteren Ergebnisse leicht schematisiert wirken. Doch liegen die dadurch entstehenden Fehler weit unter der Meßgenauigkeit. Die nächsten Abbildungen (Abb. 24 - Abb. 35) zeigen die $g^i(\lambda)$, wobei $g^0(\lambda)$ die Inverse der "1-Funktion" bedeutet.

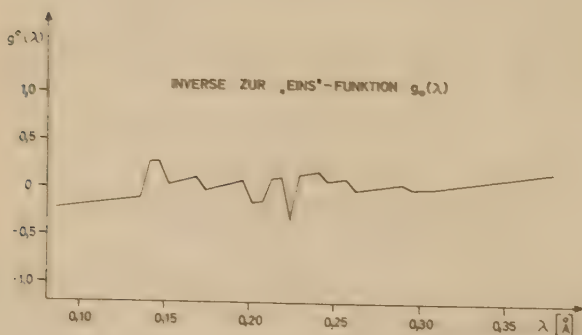


Abb. 24
Inverse der 1-Funktion

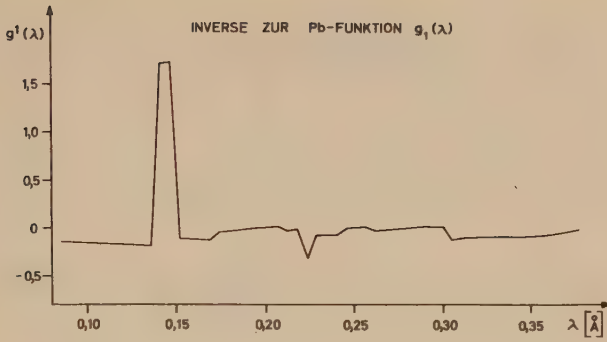


Abb. 25
Inverse der Pb-Funktion

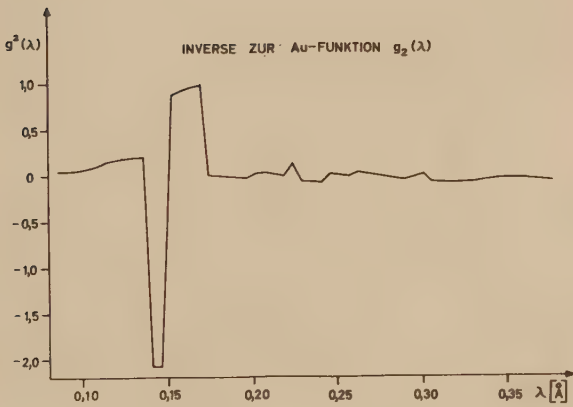


Abb. 26
Inverse der Au-Funktion

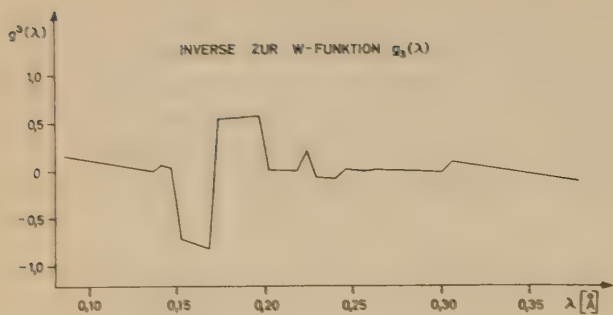


Abb. 27
Inverse der W-Funktion

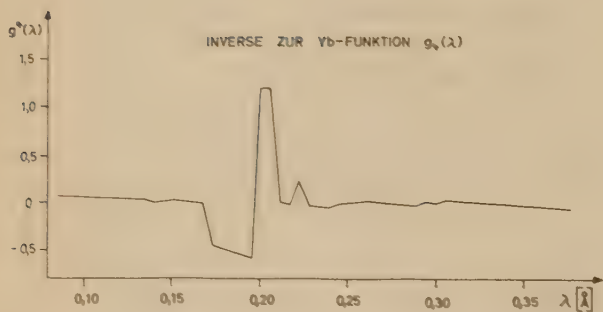


Abb. 28
Inverse der Yb-Funktion

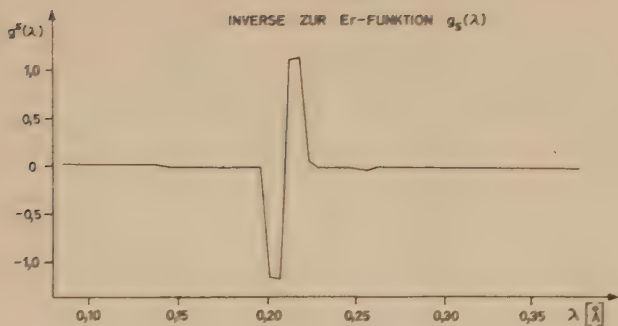


Abb. 29
Inverse der Er-Funktion

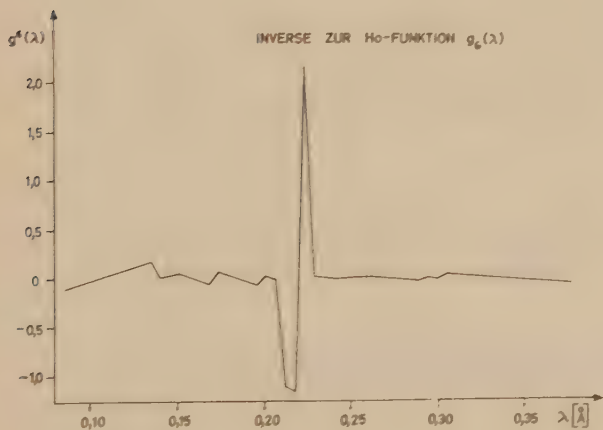


Abb. 30
Inverse der Ho-Funktion

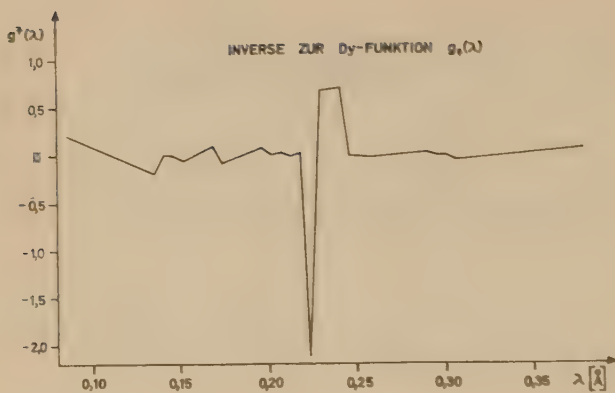


Abb. 31
Inverse der Dy-Funktion

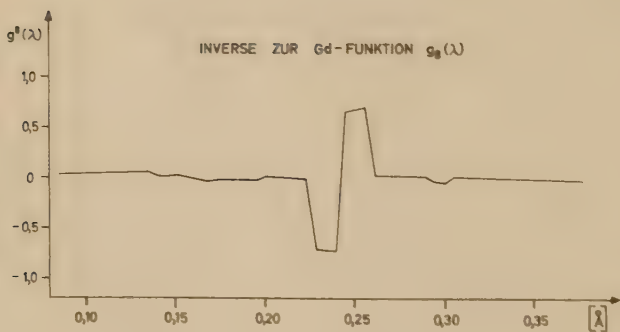


Abb. 32
Inverse der Gd-Funktion

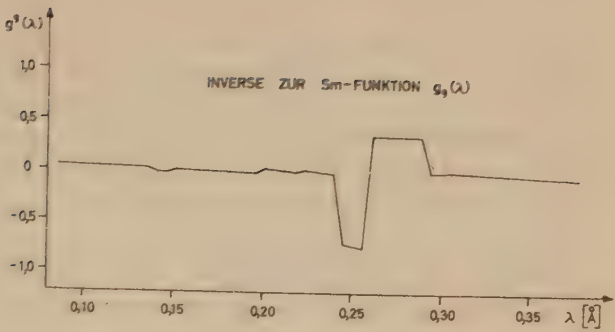


Abb. 33
Inverse der Sm-Funktion

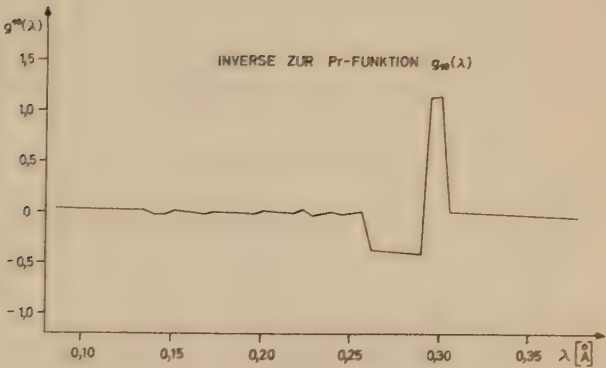


Abb. 34
Inverse der Pr-Funktion

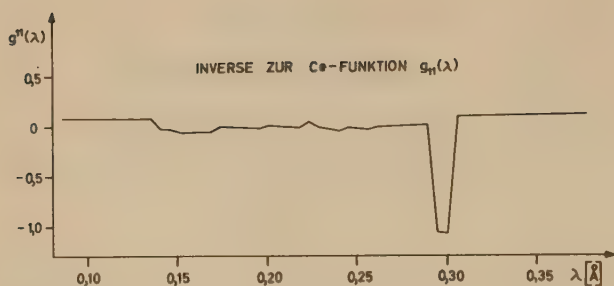


Abb. 35
Inverse der Ce-Funktion

Die besonders interessante Frage nach dem Auflösungsvermögen des Systems kann jetzt beantwortet werden. Nach Gleichung (3) geben die Gütefaktoren q_i ein Maß dafür an, inwieweit das Auflösungsvermögen der neuen Filtermethode schlechter ist als das eines Systems von Rechteckfunktionen, die zwischen je zwei benachbarten K-Absorptionskanten gegeben sind. Abbildung

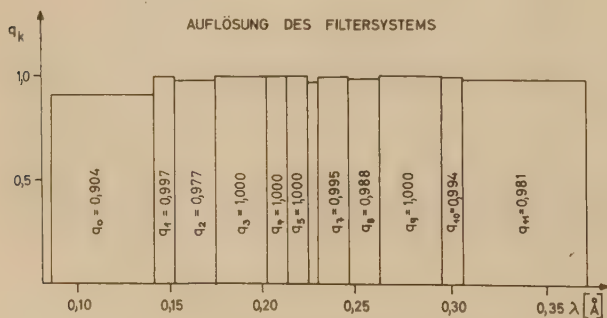


Abb. 36
Auflösungsvermögen in den Teilintervallen B_i

36 zeigt graphisch das Ergebnis von Gleichung (3). Die Breite der senkrechten Streifen zeigt den jeweiligen Abstand zweier K-Kanten, also die Breite der entsprechenden Rechteckfunktionen. Die Höhe der Streifen zeigt den Wert des betreffenden q_i an. Die Darstellung macht deutlich, daß die Intensitäten innerhalb jedes Intervalls auf etwa 1% richtig wiedergegeben werden bis auf das erste Intervall ($q_0=0,904$), in dem ohnehin keine nennenswerten Intensitäten zu erwarten sind. Hieraus folgt, daß das System allein durch die Anzahl der Filter als "balanciert" gelten kann, obwohl in dieser Richtung keinerlei Anstrengungen unternommen worden waren.

Die Kenntnisse über das Filtersystem lassen nun auch einige Rückschlüsse über den qualitativen Verlauf der zu erwartenden Meßfehler für Spektren zu. Hierfür ist der in Gleichung (9) auftretende Ausdruck $\sum [g^i(\lambda)]^2$ maßgebend, wenn man vereinfachend die ε_2^i konstant setzt. Dieser Faktor sei in Abbildung 37 aufgetragen:

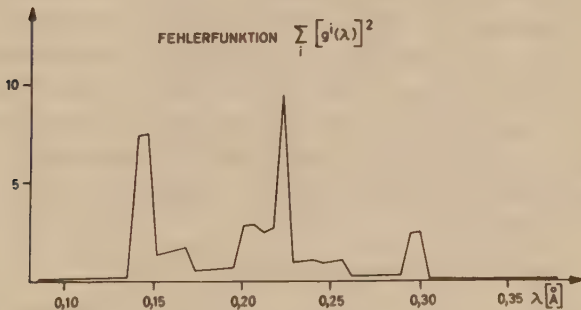


Abb. 37

Qualitativer Verlauf des Meßfehlers
bei Filtermessung von Spektren

Etwas paradox wirkt hier zunächst, daß die Meßfehler gerade an Stellen hoher Auflösung besonders groß werden. Dennoch läßt sich diese Tatsache auf geometrischem Wege leicht plausibel machen: An Stellen hoher Auflösung liegen die K-Kanten besonders dicht, und die Durchlässigkeitsfunktionen mit benachbarten K-Kanten unterscheiden sich hier nur sehr wenig voneinander, bilden also einen "besonders kleinen Winkel". Es ist aber einleuchtend, daß die Ortsmessung eines Punktes bezüglich eines schiefwinkligen Koordinatensystems desto ungenauer werden muß, je näher die Winkel der Basisvektoren an 0° oder 180° liegen.

Für die künftige Fehlerberechnung nach Gleichung (9) soll ε_1 mit 0,015 angesetzt werden; denn der Meßfehler für die g_1 liegt bei etwa 3%, und die g_1 haben überschlagsweise eine Höhe von 0,5. Die ebenfalls in die Fehlerrechnung eingehende Korrelationsfunktion Θ mag eine Breite von etwa 0,04 Å haben.

3.4.2. Messung der Streustrahlung mit Filtern

Nachdem die Vorarbeiten erledigt waren, gestaltete sich die Messung von Streuspektren verhältnismäßig einfach. Das Streupräparat wurde in die Streukammer gehängt und die Messung der Intensitäten durch die verschiedenen Filter, also die Messung von (s, g_0) ... (s, g_{11}) , entsprechend Abbildung 5 durchgeführt. Der Streuwinkel war stets $2\vartheta = 90^\circ$. Die Messungen wurden an den Elementen

Al, Fe, Ag, Sn, Sm, Pb

vorgenommen. Die Meßergebnisse für diese inneren Produkte sind in der unten stehenden Tabelle angeführt. Die aus diesen Werten nach Gleichung (2) dargestellten Spektren sind - einschließlich ihrer nach Gleichung (9) bestimmten Fehlergrenzen - in den Abbildungen 38 bis 43 gezeigt.

Meßergebnisse für die ($g_{1,s}$)
in Imp/s

Filt. Mate- rial	Filt. Nr.	Streuer:					
		Al	Fe	Ag	Sn	Sm	Pb
1	0	331 ± 3	169 $\pm 1,5$	69,0 $\pm 0,7$	59,5 $\pm 0,8$	2060 ± 17	274 ± 4
Pb	1	154 $\pm 1,5$	89,4 $\pm 0,9$	37,2 $\pm 0,4$	28,2 $\pm 0,3$	618 ± 7	177 ± 3
Au	2	174 $\pm 3,5$	96,0 $\pm 1,7$	39,6 $\pm 0,9$	29,6 $\pm 0,7$	798 ± 25	181 ± 3
W	3	203 ± 2	106,8 $\pm 1,0$	43,6 $\pm 0,5$	35,8 $\pm 0,4$	1035 ± 9	153 ± 3
Yb	4	211 $\pm 1,9$	106,9 $\pm 0,6$	44,4 $\pm 0,5$	36,8 $\pm 0,4$	1108 ± 10	155 ± 3
Er	5	182 $\pm 1,5$	88,4 $\pm 0,8$	33,1 $\pm 0,4$	27,2 $\pm 0,3$	950 ± 9	122 ± 2
Ho	6	200 $\pm 2,2$	96,6 $\pm 0,8$	36,4 $\pm 0,4$	29,2 $\pm 0,4$	1098 ± 11	139 ± 2
Dy	7	163,3 $\pm 1,1$	78,3 $\pm 0,7$	28,4 $\pm 0,3$	23,8 $\pm 0,2$	987 ± 10	119 ± 2
Gd	8	126,5 $\pm 0,9$	67,1 $\pm 0,6$	26,9 $\pm 0,3$	21,6 $\pm 0,2$	1158 ± 10	133 ± 2
Sm	9	119,0 $\pm 0,9$	66,9 $\pm 0,9$	27,6 $\pm 0,4$	21,6 $\pm 0,4$	1257 ± 11	142 ± 3
Pr	10	109,5 $\pm 1,3$	66,5 $\pm 0,9$	28,6 $\pm 0,4$	21,5 $\pm 0,2$	881 ± 7	148 ± 3
Ce	11	115,5 $\pm 1,0$	70,2 $\pm 1,0$	29,8 $\pm 0,4$	22,4 $\pm 0,3$	920 ± 8	151 ± 3

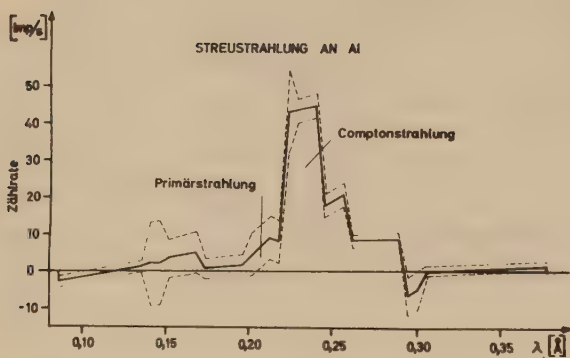


Abb. 38
W-K α , an Al unter 90° gestreut

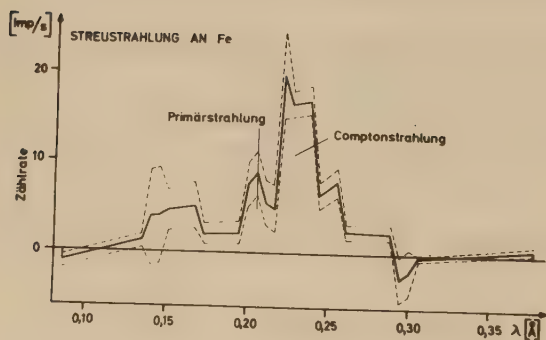


Abb. 39
W-K α , an Fe unter 90° gestreut

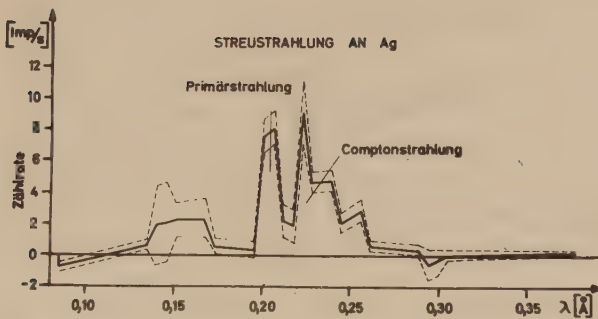


Abb. 40
W- K_α , an Ag unter 90° gestreut

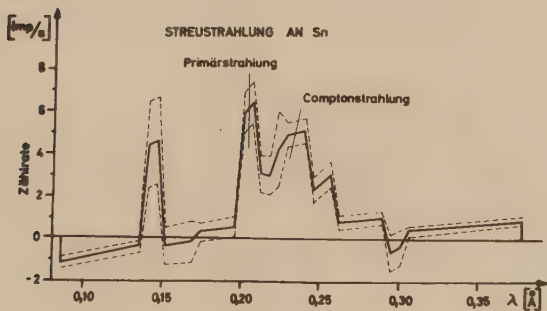


Abb. 41
W- K_α , an Sn unter 90° gestreut

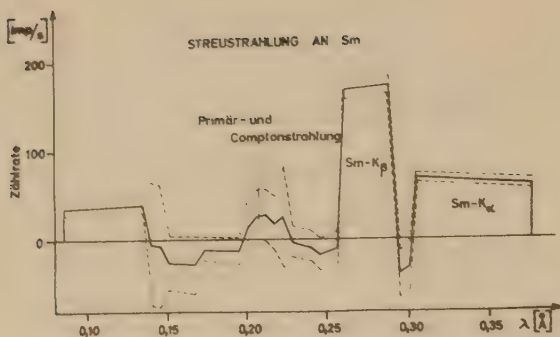


Abb. 42
W-K α , an Sm unter 90° gestreut

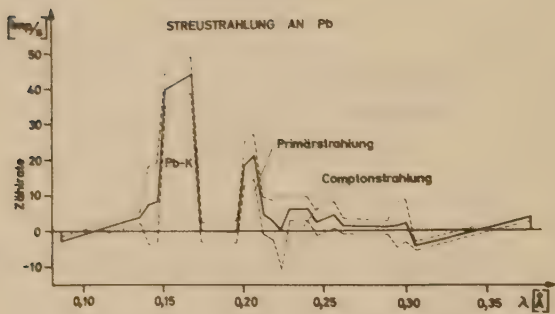


Abb. 43
W-K α , an Pb unter 90° gestreut

Ungeachtet der später vorzunehmenden physikalischen Interpretation dieser Messungen - nämlich des Intensitätsverhältnisses von kohärenter zu inkohärenter Streustrahlung - seien hier einige augenfällige Eigentümlichkeiten der Filtermethode erörtert:

Wie bereits besprochen (2.2.2. "Auflösungsvermögen"), wird jedes Spektrum durch zwölf diskontinuierliche, fast gerade Kurvenabschnitte dargestellt. Von physikalischer Bedeutung sind dabei lediglich die Integrale dieser Abschnitte über die Teilintervalle B_i . Ihre Steigung und Krümmung sind ohne Belang.

Das sonderbarste dargestellte Spektrum ist zweifellos das des Sm-Streuers. Hier überdeckt einfach die sehr starke Fluoreszenzstrahlung des Samariums die zu messenden Teile des Spektrums trotz des Versuchs, die Fluoreszenzstrahlung mit Hilfe des Impulshöhendiskriminators etwas zu dämpfen. Die Sm-K-Fluoreszenzstrahlung selbst ist hier sehr schlecht aufgelöst, weil die Absorptionskanten des Filtersystems an dieser Stelle nicht dicht genug liegen. Lediglich ihr Integralwert, der allerdings vom Impulshöhendiskriminator verfälscht ist, wird vom Filtersystem richtig wiedergegeben.

Störend wirkt sich die Fluoreszenzstrahlung auch bei der Messung an Blei aus, doch hat diese Störung hier nicht so katastrophalen Charakter, weil Blei vom Primärspektrum (Abb. 8) lange nicht so stark zur Fluoreszenz angeregt wird wie ein Element, dessen K-Absorptionskante bei nicht viel höheren Wellenlängen liegt als die der Primärstrahlung.

Die Messung an den anderen Elementen wird nicht durch Fluoreszenzstrahlung gestört, weil diese hier mit Leichtigkeit durch den Diskriminator ausgeschaltet werden kann.

Zwei weitere Anomalien der gezeigten Spektren hätten sich - nachdem ihre Ursache erkannt war - beseitigen lassen. Sie wurden jedoch nicht eliminiert, da sie charakteristisch sind für zwei typische Meßfehler bei der Filtermethode, und weil sie die Meßergebnisse kaum beeinflussen. Beispielsweise zeigt das Streuspektrum von Zinn ein recht unmotiviertes Maximum bei $\lambda = 0,14 \text{ \AA}$, während die Umgebung dieses Maximums anscheinend darum bemüht ist, diesen Fehler wenigstens im Integral zu korrigieren. Schuld an dieser Erscheinung ist nicht, wie man zunächst annehmen möchte, das Bleifilter, sondern die bereits erwähnte Inhomogenität des Goldfilters. Offenbar wurde hier die durch das Goldfilter gehende Intensität, also $(g_{2,s})$, zu gering gemessen. Folge davon ist, daß das Minimum von $g^2(\lambda)$ das Maximum von g^1 (Abb. 25 und 26) nicht völlig kompensieren kann. Weitere Folge ist, daß die Umgebung dieses Maximums negativ wird. Andere Teile des Spektrums werden von diesem Fehler kaum betroffen, weil g^2 sonst praktisch verschwindet.

Weiter fällt auf, daß fast alle Spektren an der Praseodym-K-Kante ($0,295 \text{ \AA}$) einen kleinen Sprung ins Negative machen. Dieser Effekt ist einem ganz anderen Umstand, nämlich einer fehlerhaften Durchlässigkeitskurve, zuzuschreiben. Wie oben gesagt, konnte eine Kontrollmessung für die Ce-Absorptionskurve nicht durchgeführt werden, und so wurde die Ce-Kurve hier willkürlich extrapoliert. Wenn diese Extrapolation zu tief liegt, läßt sich die Anomalie der Spektren hier gut erklären: In Gleichung (6) wäre dann $(\delta g_{11}, s')$ negativ *, $g^{11}(\lambda)$ ist an dieser Stelle ebenfalls negativ, sodaß insgesamt $\delta s_1' < 0$ werden muß.

* Für s' ist in Gleichung (6) natürlich das "wahre", nicht fehlerbehaftete s' einzusetzen, das hier sicher positiv ist.

3.4.3. Messung der Streustrahlung mit Kristall

Die Kontrollmessung zur Bestimmung des Intensitätsverhältnisses von kohärenter zu inkohärenter Streustrahlung mit dem Kristallspektrometer wurde an dem Silberstreuer vorgenommen. Die Meßanordnung entspricht der in Abb. 4 skizzierten. Die Messungen mit dem Kristall waren außerordentlich langwierig. Dies rührte vor allem daher, daß die vom Analysatorkristall kommende Intensität so gering war, daß sie selbst im Maximum in der Größenordnung des Untergrundes blieb. Dabei war der Untergrund, der außer durch Höhenstrahlung auch durch Spuren radioaktiver Verunreinigungen im Gebäude bedingt sein mag, mit Hilfe der 3 cm dicken Bleiabschirmung und des Impulshöhendiskriminators bereits auf eine Impulsrate von etwa 0,07 Imp/s herabgesetzt worden; die Intensität der Nutzstrahlung wurde dagegen durch Verwendung des Kollimators so stark wie möglich gemacht. Dies hatte auf der anderen Seite den Nachteil, daß erstens die Auflösung des Spektrometers viel schlechter wurde, und daß zweitens der Analysatorkristall von viel Strahlung getroffen wurde, die nicht im Braggwinkel einfiel, aber trotzdem Comptonstreuung im Kristall erzeugte. Dadurch wurde der Untergrund zusätzlich noch einmal kräftig angehoben. Abb. 44 zeigt das Ergebnis dieser Messungen, die ebenfalls bei einem Streuwinkel von 90° aufgenommen wurden. Der Zeitaufwand für diese Messung liegt bei sechs Wochen.

Die Auswertung dieser Kurve geschah auf folgende Weise:

Es wird angenommen, daß das in Abb. 44 gezeigte Spektrum $s(\lambda)$ sich aus drei Größen zusammensetzt: Dem kohärent gestreuten Spektrum $s_c(\lambda)$, dem inkohärent gestreuten Spektrum $s_i(\lambda)$ und einem von der Wellenlänge unabhängigen Untergrund γ . Unter der weiteren Annahme,

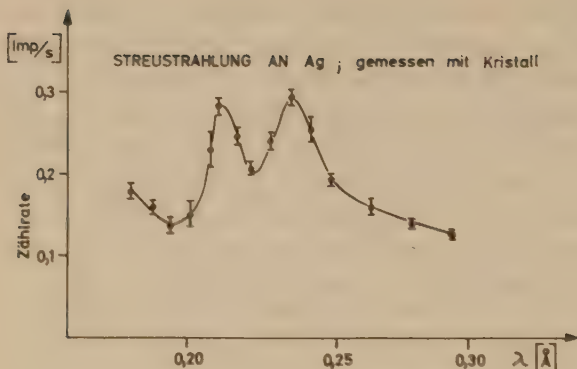


Abb. 44

W-K_α, an Ag unter 90° gestreut,
gemessen mit Kristallspektrometer

daß das Verhältnis von cohärenter zu incohärenter Streustrahlung im gegebenen Intervall nur sehr wenig von der Wellenlänge abhängt, läßt sich

$$s(\lambda) = \alpha s_c(\lambda) + \beta s_i(\lambda) + \gamma \quad (10)$$

schreiben, wobei α, β, γ nicht von der Wellenlänge abhängen. Wenn nun der relative Verlauf von $s_c(\lambda)$ und $s_i(\lambda)$ bekannt ist und beide entsprechend normiert sind, lassen sich die drei Parameter so bestimmen, daß die rechte Seite von Gleichung 10 möglichst wenig von der linken abweicht. α und β geben dann den Anteil von cohärenter und incohärenter Streustrahlung an.

s_c ist im wesentlichen gegeben durch das in Abb. 8 gezeigte Primärspektrum $s_o(\lambda)$. s_i ist dieses selbe Primärspektrum, nur um den Wert

$$\lambda' - \lambda = 2\lambda_c \sin^2 \vartheta = \lambda_c, \quad (2\vartheta = 90^\circ)$$

(λ_c = Comptonwellenlänge des Elektrons $\approx 0,024 \text{ \AA}$) zu größeren Wellenlängen verschoben. Außerdem ist s_i gegenüber s_c um die "Comptonfunktion" $C(\lambda)$ verbreitert

$$s_i(\lambda) = s_o(\lambda - \lambda_c) C(\lambda)$$

wegen der Impulsverteilung der Elektronen im streuenden Atom. Die modernste Angabe über $C(\lambda)$ stammt von D. Weick [17]. Diese Funktion wurde für die vorliegende Untersuchung so abgeändert, daß sie die beiden Bedingungen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C(\lambda) d\lambda = 1 \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda C(\lambda) d\lambda = 0$$

erfüllt. Die erste dieser beiden Forderungen sorgt dafür, daß das Integral von s_i gleich dem von s_o bleibt, während die zweite verhindert, daß s_i durch die Faltung in der Wellenlängenskala verschoben wird.

An beiden Teilspektren sind noch zwei Korrekturen vorzunehmen, bevor Gleichung (10) brauchbar wird:

1. Es ist die Absorption im Inneren des Streupräparates zu berücksichtigen. Diese Korrektur geben Bragg, James und Bosanguet [22] für ebene und "unendlich dicke" Präparate als proportional zu $1/\mu(\lambda)$ an, wenn $\mu(\lambda)$ der lineare Absorptionskoeffizient ist, der aus Tabellen [21] interpoliert werden kann. Der Silberstreuer war in der Tat ein ebenes Blech von 2 mm Dicke. Da die Halbwertsdicke von Silber für eine Wellenlänge von $0,21 \text{ \AA}$ bei $0,13 \text{ mm}$ liegt, kann man das Präparat als unendlich dick ansehen. Diese Korrektur liefert für s_c

$$s_c = s_o(\lambda) / \mu(\lambda)$$

und für s_i näherungsweise

$$s_i = \left[2s_o(\lambda - \lambda_c) / (\mu(\lambda) + \mu(\lambda - \lambda_c)) \right] C(\lambda)$$

unter der Voraussetzung, daß die Absorptionskorrektur für das relativ schmale Profil $C(\lambda)$ der Comptonlinie nicht durchgeführt zu werden braucht. Der in s_i auftretende Ausdruck $\mu(\lambda - \lambda_c)$ berücksichtigt die Absorption der einfallenden, noch unverschobenen Strahlung, der Ausdruck $\mu(\lambda)$ die der gestreuten, verschobenen Strahlung.

2. Die zweite Korrektur betrifft das durch den Kollimator bedingte, schlechtere Auflösungsvermögen des Spektrometers. wenn die "Auflösungsfunktion" mit $A(\lambda)$ bezeichnet wird, und wenn $A(\lambda)$ die üblichen Bedingungen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} A(\lambda) d\lambda = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda A(\lambda) d\lambda = 0$$

erfüllt, wird jedes Spektrum $\hat{s}(\lambda)$, das vom Spektrometer analysiert wird, zu

$$s(\lambda) = \widehat{s(\lambda)A(\lambda)}$$

verschmiert. Dies gilt auch für die beiden Teilspektren s_c und s_i , sodaß letzten Endes

$$s_c(\lambda) = [s_o(\lambda)/\mu(\lambda)] A(\lambda)$$

und

$$s_i(\lambda) = [2s_o(\lambda - \lambda_c) / (\mu(\lambda) + \mu(\lambda - \lambda_c))] \widehat{\mu(\lambda)A(\lambda)}$$

in Gleichung (10) einzusetzen sind.

Die Bestimmung von $A(\lambda)$ ist auf geometrischem Wege möglich: Der Kollimator hat, wenn man seine Fläche bei dem streifenden Einfall der Röntgenstrahlung als undurchlässig ansieht, eine dreieckförmige Winkel-Auflösungsfunktion. Die Basisbreite η dieses Dreiecks läßt sich aus der Spaltbreite d und der Länge l des Kollimators bestimmen:

ZUM AUFLÖSUNGSVERMÖGEN DES KOLLIMATORS

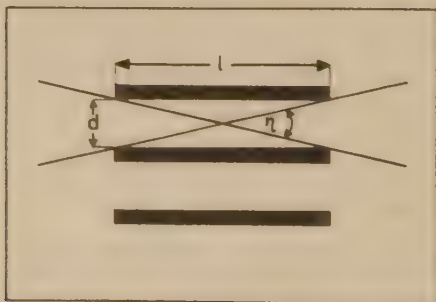


Abb. 45

Auflösung des Kollimators

$$\eta = 2d/l, \quad l \gg d.$$

Für den vorliegenden Kollimator liefert dies mit $l=95$ mm und $d=0,493$ mm einen Winkel von $\eta=0,594^\circ$ oder, umgerechnet auf den Reflexionswinkel von $7,6^\circ$ für $\lambda=0,21$ Å eine Breite von $0,0163$ Å in der Wellenlängenskala. Die Überprüfung dieser eigentlich nur postulierten Auflösungsfunktion geschah dadurch, daß in die Streukammer ein Wolframblech gehängt und die sehr starke K_α -Fluoreszenzstrahlung sorgfältig ausgemessen wurde. Abbildung 46 zeigt das Ergebnis dieser Messung (ausgezogene

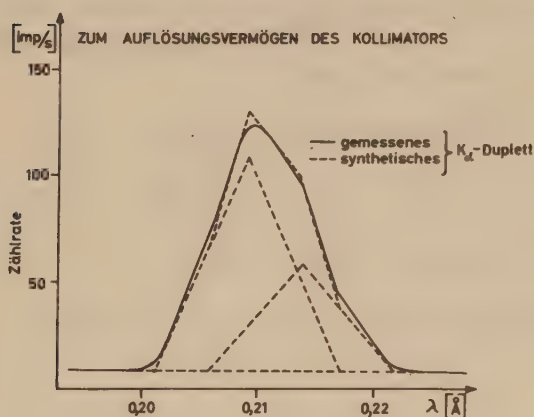


Abb. 46
Überprüfung der Auflösungsfunktion $A(\lambda)$ durch Ausmessen des W- K_α -Dupletts

zogene Linie). Dann wurde rechnerisch das K_α -Duplett mit der Dreiecksfunktion verschmiert. Die beiden sich überlappenden, punktierten Dreiecke zeigen die verschmierte $K_{\alpha 1}$ - und $K_{\alpha 2}$ -Linie. Die Summe dieser Dreiecke ist die Faltung von $A(\lambda)$ mit dem K_α -Duplett. Die Übereinstimmung mit der Messung ist so gut, daß die gleichzeitige Darstellung der theoretischen (gestrichelt) und der gemessenen Kurve auf graphische Schwierigkeiten stößt.

Weiter sei nun vereinfachend angenommen, daß $A(\lambda)$ im interessierenden Wellenlängenintervall überall die gleiche Breite habe.

s_c und s_i sind nun eindeutig bestimmt und die Koeffizienten α , β , γ aus Gleichung (10) lassen sich nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmen. Es soll also

$$I = \int (s - \alpha s_c - \beta s_i - \gamma)^2 d\lambda$$

ein Minimum in Abhängigkeit von den drei Koeffizienten werden. Aus dieser Forderung ergeben sich drei linear unabhängige Gleichungen, nämlich

$$\partial I / \partial \alpha = 0, \quad \partial I / \partial \beta = 0, \quad \partial I / \partial \gamma = 0.$$

Diese Gleichungen lauten explizit

$$\begin{aligned} \alpha \int s_c^2 d\lambda + \beta \int s_c s_i d\lambda + \gamma \int s_c d\lambda &= \int s_c s d\lambda \\ \alpha \int s_c s_i d\lambda + \beta \int s_i^2 d\lambda + \gamma \int s_i d\lambda &= \int s_i s d\lambda \\ \alpha \int s_c d\lambda + \beta \int s_i d\lambda + \gamma \int d\lambda &= \int s d\lambda \end{aligned} \quad (11)$$

Da durch das häufige Auftreten von Faltungsintegralen

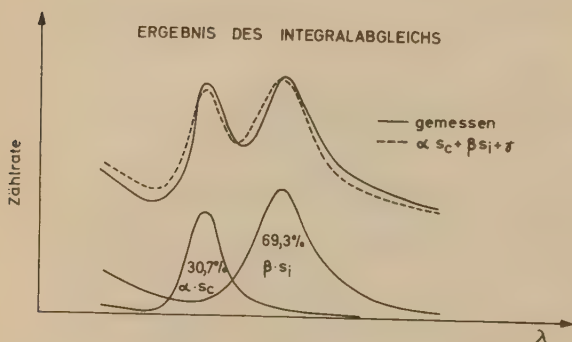


Abb. 47

Analyse des in Abb. 44 wiedergegebenen Spektrums

schon bei der Bestimmung von s_c und s_i die numerischen Rechnungen sehr umfangreich geworden wären, wurde die Lösung dieses Gleichungssystems einer elektronischen Rechenanlage anvertraut.

Das Ergebnis dieser Rechnung ist in Abbildung 47 aufgetragen. Die Übereinstimmung der gemessenen (durchgezogenen) und der synthetischen (gestrichelten) Kurve ist gut, doch ist zu erkennen, daß die Anteile der beiden Streustrahlungskomponenten gut um 2 oder 3% variiert werden könnten, ohne daß die Übereinstimmung wesentlich schlechter wird.

3.5. Diskussion der Ergebnisse

3.5.1. Diskussion der Meßergebnisse

Das Verhältnis von cohärenter zu incohärenter Streustrahlung wurde durch Ausplanimetrieren der Kurven in den Abbildungen 38 bis 43 bestimmt. Das komplizierte Verfahren für die Kristallmessung ist hier nicht nötig, weil die beiden Strahlungskomponenten genügend gut getrennt sind. Die durch das Planimetrieren erhaltenen Flächen wurden für die Absorption im Streuer korrigiert. Der Fehler dieser Meßergebnisse wird überwiegend durch den der unmodifizierten Strahlung bestimmt. Denn die Comptonstrahlung wird durch mehrere K-Kanten zerlegt, und die Fehler der verschiedenen Bereiche zwischen den K-Kanten sind unkorreliert, sodaß der Gesamtfehler für die Comptonstrahlung klein wird gegen den der nur durch eine K-Kante dargestellten unmodifizierten Strahlung. In Abbildung 48 sind die Er-

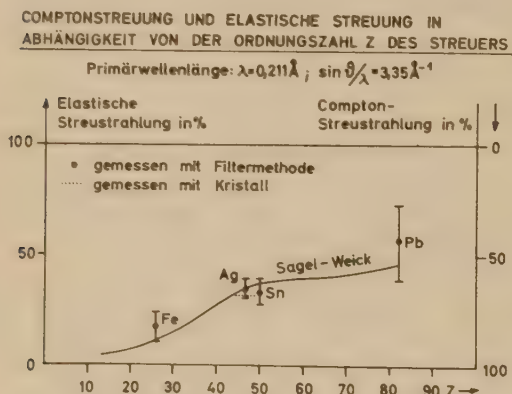


Abb. 48

Verhältnis von elastischer zu unelastischer Streustrahlung als Funktion von der Ordnungszahl des Streuers.

gebnisse einschließlich des mit dem Kristall gemessenen (punktierte Linie) aufgetragen, wobei die zu unsicheren Messungen an Aluminium und Samarium fortgelassen wurden.

Die durchgezogene Kurve ist das Ergebnis der Theorie. Für die theoretische Behandlung des Problems wurde angenommen, daß der Streuer aus isolierten Atomen besteht. Gegen diese Annahme könnten zwei Einwände erhoben werden, die aber leicht zu entkräften sind:

1. Bei gebundenen Atomen ist der Atomformfaktor etwas verändert gegenüber den tabellierten. Da aber die Primärstrahlung mit etwa 59 kV eine sehr hohe Energie gegenüber den Bindungsenergien darstellt, sind die Valenzelektronen für diese Strahlung ohnehin als "frei" zu betrachten und werden - ob es sich nun um freie oder gebundene Atome handelt - fast nur Comptonstreuung verursachen.
2. Durch das Kristallgefüge, in das die Atome im Festkörper eingebettet sind, besteht die Gefahr, daß man für die kohärente Streustrahlung in einem Bragg-Reflex zu hohe Intensitäten, zwischen zwei Reflexen zu niedrige Intensitäten mißt. Bei dem gegebenen hohen Wert von $\sin\theta/\lambda (=3,35/\text{\AA})$ zerstört jedoch die thermische Schwingung der Atome jede Möglichkeit für das Auftreten von Reflexen. Im kritischsten Fall, nämlich Eisen, beträgt der Debye-Waller-Faktor [23], [24], [25] nur etwa 3%. Bei den anderen Elementen liegt er weit unter 0,1%.

Die Intensität der kohärenten Streustrahlung wurde aus den Atomformfaktoren der Elemente bestimmt. Diese Atomformfaktoren wurden einer unveröffentlichten Arbeit entnommen [26], deren Autoren sie nach der Hartree-Fock-Slater-Methode errechnet hatten. Sie wurden nach Sagel [27] für anomale Dispersion korrigiert. Die Intensität der Comptonstrahlung wurde nach Weick [17] bestimmt.

Als Ergebnis für den Vergleich zwischen Theorie und Experiment kann gesagt werden, daß beide innerhalb der Meßfehler übereinstimmen. Derartig krasse Diskrepanzen wie sie von Woo [10], [11] beobachtet wurden, sind bei $\sin\theta/\lambda = 3,35/\text{\AA}$ auf keinen Fall für die Elemente Fe, Ag und Sn zu bemerken.

3.5.2. Anwendungsmöglichkeiten und Grenzen der Filtermethode

Wie aus den Abbildungen 24 bis 35 ersichtlich, stellen die reziproken Funktionen sozusagen die negative Ableitung von δ -Funktionen innerhalb des Auflösungsvermögens des Systems dar. Das Maximum einer Funktion wird jeweils vom Minimum der folgenden Funktion in geeigneter Weise kompensiert. So läuft die hier vorgeschlagene Filtermethode - ebenso wie das Ross-Filterverfahren - auf Differenzmessungen hinaus.

Die V o r t e i l e der neuen Filtermethode liegen zweifellos in der hohen Geschwindigkeit, mit der verhältnismäßig harte Röntgen- oder weiche γ - Spektren gemessen werden können. Während die Messung mit dem Kristall sechs Wochen dauerte, waren die Messungen mit den Filtern in der Regel nach vier Stunden beendet. Ein großer Teil dieser Zeit fiel dabei auf das etwas primitive Auswechseln der Filter, die von Hand in den Strahlengang gebracht und aus ihm entfernt wurden. Der Zeitgewinn liegt also etwa bei dem Faktor 50. Die Filtermethode ist - abgesehen vom Röntgengebiet - überall dort anwendbar, wo Filter zur Verfügung stehen, deren Durchlässigkeitsfunktionen sich genügend charakteristisch voneinander unterscheiden. Torfunktionseigenschaft der Durchlässigkeit ist nicht erforderlich. Der Vorteil gegenüber dem Ross-Filterverfahren besteht darin, daß das sehr mühsame Balancieren der Filter entfällt.

Der wichtigste N a c h t e i l der neuen Methode ist der, der jeder Differenzmessung anhaftet: Die Messungen müssen genügend genau sein. Ferner ist es ungünstig, daß das zu messende Spektrum außerhalb des Definitionsbereichs des Filtersystems verschwinden muß. Diese Forderung kann aber häufig durch Verwendung eines Impulshöhendiskriminators erfüllt werden. Ein

weiterer Einwand, daß nämlich für die neue Methode die Verwendung einer programmgesteuerten Rechenmaschine sehr wünschenswert ist, dürfte angesichts der zunehmenden Verbreitung derartiger Anlagen und der Handlichkeit der modernen Programmierungssprachen als entkräftet gelten.

4. Zusammenfassung

=====

Es wird eine neue Filtermethode zur Messung von Röntgenspektren angegeben. Hierzu können beliebig viele, nicht balancierte Filter verwendet werden, wenn ihre Durchlässigkeitsfunktionen $g_i(\lambda)$ nur linear unabhängig sind. Die Methode basiert - ähnlich wie das Ross-Filterverfahren - darauf, daß das zu messende Spektrum $s(\lambda)$ nacheinander durch die verschiedenen Filter gesandt und hinter den Filtern die Intensität

$$\int s(\lambda) g_i(\lambda) d\lambda$$

gemessen wird. Die so erhaltenen Informationen über $s(\lambda)$ lassen sich als kovariante Koordinaten des Spektrums bezüglich des nicht-orthogonalen Funktionensystems der $g_i(\lambda)$ deuten. So ist es möglich, die Projektion $s'(\lambda)$ des Spektrums in den Filterfunktionsraum auf vektoralgebraischem Wege zu ermitteln, indem die Projektion als Linearkombination

$$s'(\lambda) = \sum_i r^i g_i(\lambda)$$

mit geeigneten Koeffizienten r^i dargestellt wird. Zur Beantwortung der mit der neuen Methode zusammenhängenden Fragen nach Auflösungsvermögen und Fehlerfortpflanzung werden numerische Verfahren entwickelt.

Ein aus elf Filtern (Oxyden der Elemente mit den Ordnungszahlen 58, 59, 62, 64, 66, 67, 68, 70, 74, 79 und 82) hergestelltes Filtersystem lieferte Gütefaktoren, die im Mittel um nur 1% von Eins abweichen. Dies bedeutet, daß die Fehler, die durch das "Nicht-Balancieren" entstehen, für das vorliegende Filtersystem in der Größenordnung von 1% liegen. Mit diesen Filtern ist es möglich, sehr schwache Spektren weit schneller als mit dem Kristallmonochromator und mit befriedigender Genauigkeit zu messen.

Als Nebenergebnis wurde das Intensitätsverhältnis von cohärenter zu incohärenter Streustrahlung bei einer Primärwellenlänge von $0,21 \text{ \AA}$, einem Streuwinkel von $29=90^\circ$ und den Streuern Fe, Ag, Sn und Pb gemessen. Die erhaltenen Werte stimmen innerhalb der Meßfehler gut mit den theoretischen Daten überein, die nach Weick [17] und Hanson [26] berechnet worden sind. Diskrepanzen, wie sie Woo [10] gemessen hat, sind nicht zu bemerken.

5. Literaturverzeichnis

=====

- [1] Ross, P.A.: Rev. Sci. Instr. 16, 433 (1928)
- [2] "International Tables for X-Ray Crystallography",
Birmingham, England, The Kynoch Press, (1962)
- [3] Kirkpatrick, P.: Rev. Sci. Instr. 10, 186 (1939)
- [4] Kirkpatrick, P.: Rev. Sci. Instr. 15, 223 (1944)
- [5] Soules, J.A. usw.: Rev. Sci. Instr. 27, 12 (1956)
- [6] McKinstry, H.A.: J. Sci. Instr. 37, 178 (1960)
- [7] Young, R.A.: Z. Kristallogr., 118, 233 (1963)
- [8] Wollan, E.O.: Phys. Ztschr. 35, 353 (1934)
- [9] Kappeler, H.: Ann. d. Phys. 27, 129 (1936)
- [10] Woo, Y.H.: Phys. Rev. 27, 119 (1926)
- [11] Woo, Y.H.: Phys. Rev. 28, 426 (1927)
- [12] Compton, A.H. und Allison, S.K.: "X-Rays in Theory
and Experiment", D. van Nostrand Comp,
Princetown usw (1957)
- [13] Wentzel, G.: Phys. Z. 43, 779 (1927)
- [14] Debye, P.: Phys. Z. 31, 419 (1930)
- [15] Heisenberg, W.: Phys. Z. 32, 737 (1931)
- [16] Bewilogua, L.: Phys. Z. 32, 740 (1931)
- [17] Weick, D.: Dissertation an der Technischen Univer-
sität Berlin (1967)
- [18] Hosemann, R.: Z. Phys. 154, 389 (1959)
- [19] Hosemann, R. und Bagchi, S.N.: "Direct Analysis of
Diffraction by Matter", North-Holland Publ.
Comp., Amsterdam (1962)
- [20] Barth, H.: Z. Naturforsch. 131, 680 (1958)
- [21] Weast, R.C. usw., "Handbook of Chemistry and Physics",
The Chemical Rubber Comp., Cleveland, Ohio (1965)
- [22] Bragg, W.L., James, R.W. und Bosanguet, C.H.: Phil.
Mag. 41, 309 (1921)
- [23] Debye, P.: Ann. D. Phys. 43, 49 (1914)
- [24] Waller, J.: Z. Phys. 17, 398 (1923)
- [25] Waller, J.: Z. Phys. 51, 213 (1928)
- [26] "H-F-S-Atomic Structure Factors", Hanson, H.P.,
University of Texas usw., (1963) unveröffentlicht
- [27] Sagel, K.: "Tabellen zur Röntgenstrukturanalyse",
Springer-Verl., Berlin usw. (1958)

6. Verzeichnis der mathematischen Symbole

=====

Mit lateinischen Zeichen beginnende Symbole:

Zeichen	Bedeutung	Seite Nr.
$A(\lambda)$	Auflösungsfunktion des Kollimators	50
B	Wellenlängenintervall $\lambda_0 \leq \lambda \leq \lambda_1$, innerhalb dessen die Filterdurchlässigkeiten bekannt sind	5
B_i	Teilintervalle von B zwischen zwei K-Kanten	7
$C(\lambda)$	"Compton-Funktion", Profil der Comptonlinie	49
d	Breite eines einzelnen Kollimatorspalts	50
$F(\lambda, \lambda')$	Integralkern von G	6
G	Projektionsoperator nach U	6
$g_i(\lambda)$	Durchlässigkeitsfunktionen der Filter	4
$g_i^{-1}(\lambda)$	Inverse der $g_i(\lambda)$	5
g_{ik}	Metrischer Tensor der $g_i(\lambda)$	5
g^{ik}	Reziproker Tensor zu g_{ik}	5
H	Hilbertraum der über B quadratisch integrierbaren Funktionen	5
i	Zählindex, läuft von 0 bis N	-
K_i	Wellenlängen der K-Absorptionskanten	5
k	Zählindex wie i	-
L	Korrelationslänge	12
l	Länge des Kollimators	50
N	Zahl der verwendeten Filter	4
q_i	Gütefaktoren	9
$s(\lambda)$	beliebige Spektralfunktion aus H, die außerhalb von B verschwindet	4
$s_o(\lambda)$	Primärspektrum	48
$s_c(\lambda)$	cohärent gestreute Komponente eines Spektrums	47
$s_i(\lambda)$	Compton-Komponente eines Spektrums	47
$t_i(\lambda)$	Rechteckfunktion über B_i	9
U	Unterraum von H, aufgespannt von den $g_i(\lambda)$	5
Z	Ordnungszahl eines Elements	-

Mit griechischen Zeichen beginnende Symbole:

Zeichen	Bedeutung	Seite Nr.
α	Gewicht von $s_c(\lambda)$	48
β	Gewicht von $s_i(\lambda)$	48
γ	Untergrundkomponente eines Streuspektrums	47
ΔB_i	Länge der Teilintervalle B_i	8
δ	Variation oder Fehler einer Größe	9
ε_{1i}	absoluter Meßfehler der $g_i(\lambda)$, Mittel	11
ε_{2i}	absoluter Meßfehler der Intensität durch das i-te Filter	13
η	Öffnungswinkel des Kollimators	50
θ	Korrelationsfunktion	13
ϑ	halber Streuwinkel	-
λ	Wellenlänge	-
λ_0	untere } Grenze des Intervalls B	5
λ_1	obere }	5
λ_c	Comptonwellenlänge des Elektrons	49
$\mu(\lambda)$	linearer Absorptionskoeffizient	49

Sonderzeichen:

Zeichen	Bedeutung	Seite Nr.
(...,...)	Inneres Produkt der eingesetzten Funktionen	5
Θ	Kennzeichnung für Differenzraum. Beispiel: $H \Theta U$ ist der Unterraum von H, der zusammen mit U den gesamten Hilbertraum H aufspannt	6
$\frown$	Kennzeichnung für das Faltungsintegral zweier Funktionen	13
'	Kennzeichnung der Komponente einer Funktion, die in U liegt	6
"	Kennzeichnung der Komponente einer Funktion, die in $H \Theta U$ liegt	6
ϵ	Kennzeichnung für den Sachverhalt "Element von". Beispiel: $s \epsilon H$ bedeutet, daß $s(\lambda)$ eine zum Hilbertraum H gehörende Funktion ist	5

Die vorliegende Arbeit wurde unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. R. Hosemann am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft angefertigt. Herrn Prof. Hosemann möchte ich für sein großes Interesse an der Arbeit und für viele anregende Diskussionen recht herzlich danken.

Gleichfalls gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. R. Honerjäger und Herrn Dr. D. Weick für zahlreiche, fördernde Gespräche. Dem Fritz-Haber-Institut, dem Hahn-Meitner-Institut für Kernforschung und dem Institut für theoretische Physik an der Freien Universität Berlin danke ich hiermit für das zeitweise Überlassen ihrer elektronischen Rechenanlagen ICT 1909, GIER, Siemens 2002 und Zuse Z 23.

Ferner bin ich dem ERP-Fonds und dem Senator für Wirtschaft und Kredit für die finanzielle Unterstützung meiner Arbeit zu Dank verpflichtet.

Lebenslauf

=====

Am 28. November 1934 wurde ich als Sohn des Diplomvolkswirts Dr. Fritz Wegener und seiner Ehefrau Lia, geb. Reimerdes, in Landsberg an der Warthe geboren. Ab 1941 besuchte ich die Volksschule in Dessau, wohin wir inzwischen umgezogen waren. Nach dem Umbruch war ich dort Schüler des humanistischen Gymnasiums bis zur Flucht nach West-Berlin 1951. 1954 bestand ich am Arndt-Gymnasium in Berlin-Dahlem die Reifeprüfung und begann mein Physikstudium an der Freien Universität Berlin. In den Jahren 1959 und 1960 fertigte ich hier meine Diplomarbeit unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. R. Honerjäger an und schloß sie mit der Diplomprüfung ab. Anschließend übernahm ich einen Forschungsauftrag zur Messung des Intensitätsverhältnisses von cohärenter zu incohärenter Röntgenstreustrahlung unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. R. Hosemann am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft. 1963 heiratete ich. Die vorliegende Dissertation ist aus dem erwähnten Forschungsauftrag hervorgegangen.

Berlin, den 30. März 1967

Konrad Wegener

(Konrad Wegener)

